MECÁNICA CUÁNTICA

o acerca de la convergencia del infinito absolutamente pequeño en magnitudes discretas. Abordemos el estudio del infinito, del mundo de Planck, de la cuantización y del más acá y las concomitancias entre la Mecánica Cuántica y la Filosofía de Spinoza, verdadero objeto de estudio de todos estos textos. ¿Está la sustancia, según los datos obtenidos por la experiencia, determinada?

Deus sive natura.

Vale.

S E V I L L A - T O R R E - F U E N T E S

MMXXIII

SIN LICENCIA (ni falta) DE LA AUTORIDAD

Hacia el infinito y más acá.

A lo largo de las siguientes páginas voy a dejar recogido, con la mayor cantidad de detalle posible, el proceso que he seguido para comprender (o intentarlo) la Mecánica cuántica. Doy mi palabra de que va a ser un camino divertido y gratificante. Vayamos juntos, paso a paso, hacia lo profundo de la naturaleza.

Como cabe esperar, el principio de todo esto requiere de un refresco acerca de las herramientas necesarias para adentrarnos en los arcanos de la naturaleza de lo muy pequeño (¿o de lo pequeño de la naturaleza?).

¿Por qué los números complejos?

Veamos qué tipo de números nos suenan de la época de la escuela y el instituto[1].

[1] Nos ahorramos explicaciones pues basta un mínimo de cultura general para que estos conjuntos sean conocidos por todos.

Números Naturales: $\mathbb{N}$

$$\mathbb{N} = 0,1,2,3,4,5,\ldots$$

Números Enteros: $\mathbb{Z}$

$$\mathbb{Z} = \cdots, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, \ldots$$

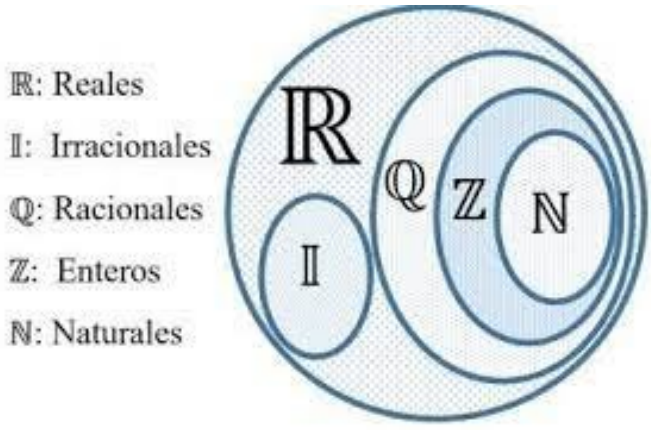
Números Racionales: $\mathbb{Q}$

$$\mathbb{Q} = \frac{2}{3}, \frac{5}{8}, \frac{1}{2}, \frac{7}{4}, \frac{10}{9}, \frac{4}{22}, \cdots$$

Los números Irracionales: $\mathbb{I}$. Aquellos cuyos decimales son infinitos y sin encerrar periodicidades.

$$\mathbb{I} = \pi, e, \phi, \sqrt{2}, \ldots$$

Todos ellos, agrupados dentro de un mismo conjunto según representamos a continuación, conforman el conjunto de los números Reales: $\mathbb{R}$.



Todos ellos podríamos recogerlos en una recta con origen en $-\infty$ y fin en $+\infty$. Todos ellos cabrían en dicha recta. Recta que denominamos la Recta Real.

Podríamos ir saltando de un punto a otro de dicha recta empleando las diferentes operaciones que conocemos como la suma, la resta, el producto, la división, la raíz cuadrada, etc… Podemos viajar por todo ese infinito. Pero, *sólo por ese infinito*[2].

En nuestro recorrido por la Recta Real nos topamos con una regla que es conocida por todos: nadie puede obtener un número negativo a partir del producto de un número, cualquiera que sea, por sí mismo. Es decir, el cuadrado de cualquier número siempre arroja como resultado un número positivo. Esto lo podemos expresar como que es imposible encontrar en la Recta Real, con todos sus infinitos, un número que nos permita sacar al -1 de esta prisión: $\sqrt{-1}$.

Dicho número pertenecería a otro mundo, a otra dimensión, … a otra recta.

¿Y si creamos otra recta diferente a la Real? ¿Y si la imaginamos? ¿Y si imaginamos una recta en la que existen esos números?

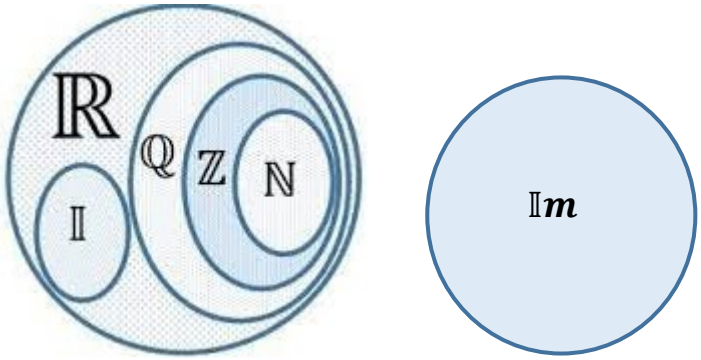
Pues sí. Dicha recta, dicho mundo, se ha imaginado y ha dado lugar al subconjunto de los números imaginarios, cuyo ladrillo fundamental es:

$$i = \sqrt{-1}$$

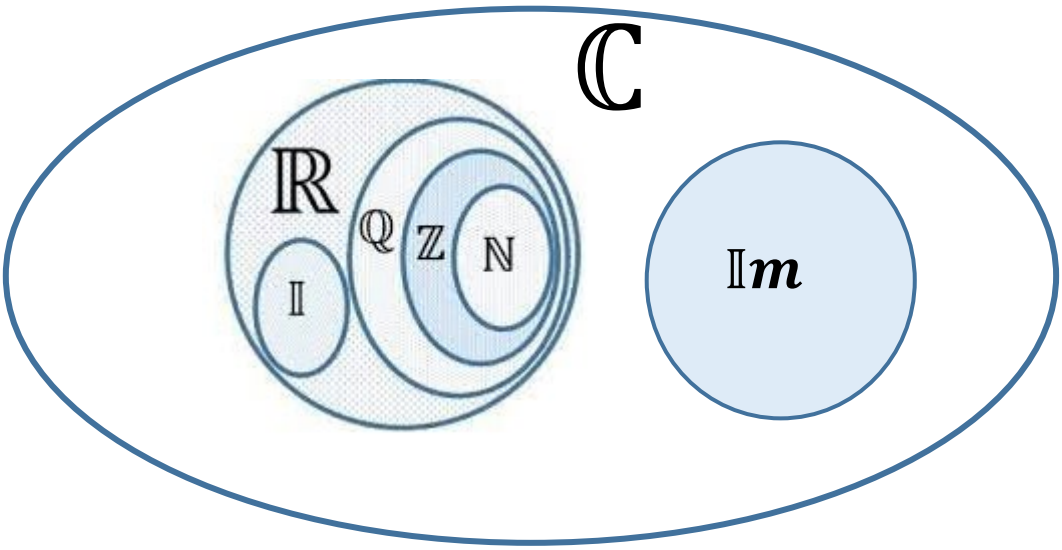
A nuestro conjunto de conjuntos de números habremos de sumar un conjunto más: el de los números imaginarios, $\mathbb{I}\boldsymbol{m}$, que, además no hace

[2] Incluso para referirnos a ese infinito deberíamos haber dicho esos infinitos apelando a las conclusiones de los estudios de George Cantor. Pero no es apropiado para el fin que perseguimos adentrarnos ahora en sus demostraciones y su índice $\aleph$.

intersección con ninguno de los números reales. Es normal ya que se trata de un nuevo conjunto imaginario que nada tiene de real.

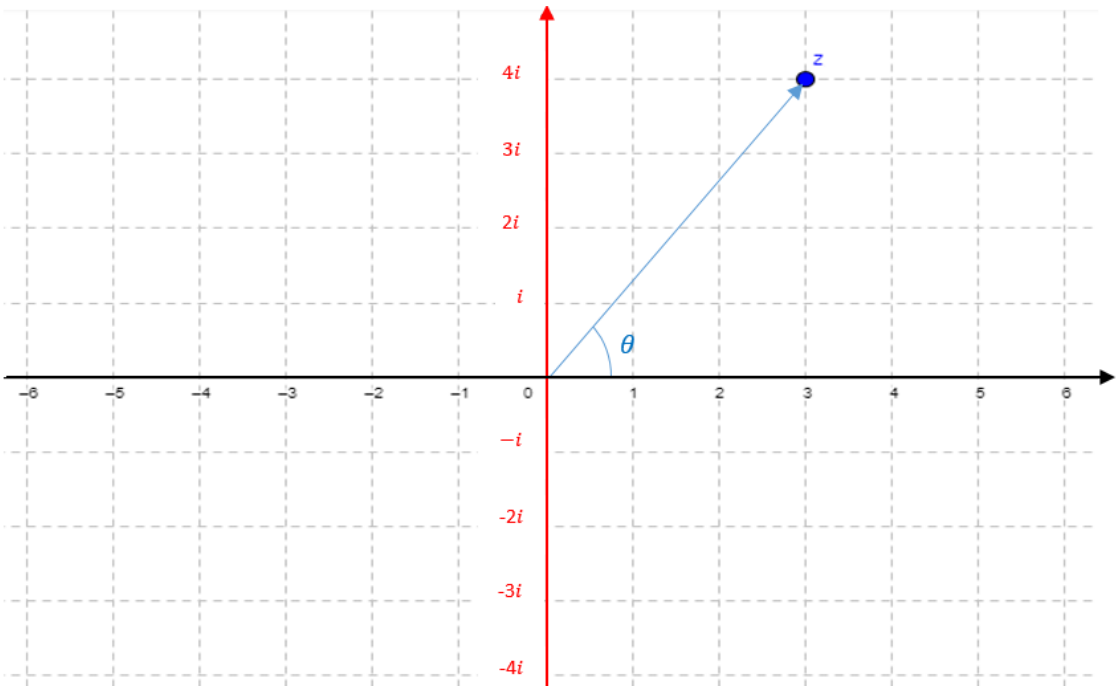


Y, aunque sea para satisfacer la necesidad de orden que tiene el cerebro humano, podemos crear un conjunto aún mayor. Un conjunto del que los números Reales e Imaginarios sean un subconjunto. El conjunto de los números complejos ℂ:



Los números complejos tendrán dos naturalezas: una componente real y otra imaginaria y podrán representarse en un eje cartesiano en el

que el eje de abscisas represente a la recta real y el eje de ordenadas a la Recta Imaginaria.



Donde el número Z tiene una parte real y otra imaginaria:

$$z = 3 + 4i$$

θ

No existe en el mundo clásico magnitud escalar, vectorial, tensorial que pueda responder a esta estructura[3]. Sin embargo, en el mundo cuántico todo es suficientemente disruptivo como para requerir de esta nueva nomenclatura.

[3] Por supuesto esto no estrictamente así. Lo reflejamos así para que sintamos la extrañeza del mundo cuántico. En el mundo clásico hay innumerables aplicaciones de los números complejos como, por ejemplo, en el cálculo de la impedancia (el sumatorio de la resistencia del medio + resistencia capacitiva + resistencia inductiva).

Podemos expresar los números complejos según varias formas.

Forma rectangular:

$$z = 3 + 4i$$

Forma Polar[4]:

$$z = r \cdot \angle\theta \rightarrow r \cdot (\cos\theta + i \sin\theta)$$

Forma exponencial:

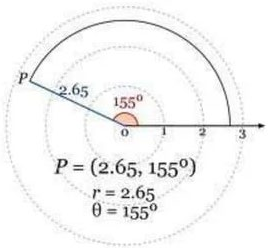
$$z = r \cdot e^{i\theta}$$

Para ejercitar un poco la mente, pasemos nuestro número complejo z de la Forma rectangular a la Forma polar y exponencial.

En primer calculemos, mediante Pitágoras, el radio que conforma nuestro punto con el punto (0,0) de nuestros ejes:

$$z = 3 + 4i$$

[4] En las coordenadas polares, realmente sólo necesitamos un radio y un ángulo. Para saber más véase Apuntes de Filosofía Física: Relatividad Especial y General de Iohannes Svlis.



$$r = \sqrt{3^2 + 4^2} = \sqrt{25} = 5$$

Y ahora calculemos el ángulo θ (lo vamos a expresar en grados pero habitualmente lo haremos en radianes):

$$\cos\theta = \frac{3}{5} \rightarrow \arccos\frac{3}{5} \approx 53°$$

Por lo que en su Forma polar será:

$$z = 5(\cos 53° + i \sin 53°)$$

Y en su Forma exponencial (igualmente lo normal será expresarlo en radianes):

$$z = 5e^{i\,53°}$$

Hagamos otro, esta vez, en radianes.

Supongamos el siguiente número complejo en su forma rectangular:

$$z = 1 - \sqrt{3}i$$

$$|z| = \sqrt{1^2 + \left(-\sqrt{3}\right)^2} = 2$$

Y puesto que:

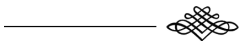
$$arctan\theta^{-1} = -\frac{\sqrt{3}}{1} = -60° = -\frac{\pi}{3}\ rads$$

Entonces:

$$z = 2 \cdot \left(\cos\left(-\frac{\pi}{3}\right) + \sin\left(-\frac{\pi}{3}\right) i\right)$$

Y:

$$z = 2e^{-1\frac{\pi}{3}}$$



Definamos ahora algunas operaciones básicas que podemos hacer con los números complejos. Hagámoslo primero desde su Forma rectangular.

A. Suma[5].

$$z_1 = 3 + 4i \qquad + \qquad z_2 = 5 + 2i$$

En el caso de la suma, sencillamente sumamos la parte real con la parte real y la parte imaginaria con la parte imaginaria.

$$z_3 = z_1 + z_2$$

$$z_3 = (3 + 5) + (4i + 2i)$$

$$z_3 = (8) + i(4 + 2)$$

$$z_3 = 8 + 6i$$

B. Producto.

$$z_1 = 3 + 4i \cdot \ z_2 = 5 + 2i$$

Hagámoslo por fuerza bruta y después extraigamos un patrón del resultado.

$$z_3 = (3 + 4i)(5 + 2i)$$

$$z_3 = (3 \cdot 5) + (3 \cdot 2i) + (4i \cdot 5) + (4i \cdot 2i)$$

$$z_3 = (15) + (6i) + (20i) + (8i^2)$$

$$z_3 = (15) + (6i) + (20i) + (8\sqrt{-1}^2)$$

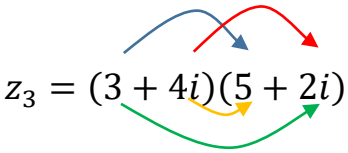
$$z_3 = (15) + (6i) + (20i) + \big(8 \cdot (-1)\big)$$

$$z_3 = (15 - 8) + i(6 + 20)$$

$$z_3 = 7 + 26i$$

Con carácter general se emplea este truco:

[5] Lo mismo para la resta.



Siendo (sólo se usan partes reales):

$$(Azul - rojo) + i(verde + amarillo)$$

Es decir:

$$z_3 = (15 - 8) + i(6 + 20)$$

$$z_3 = 7 + 26i$$

$$Q.E.D.$$

C. División.

Para ello bastará buscar la diferencia de cuadrados en el denominador multiplicando por 1 presentado como una fracción del número *conjugado*[6].

$$z_3 = \frac{3 + 4i}{5 + 2i}$$

$$z_3 = \frac{3 + 4i}{5 + 2i} \cdot \frac{5 - 2i}{5 - 2i}$$

Aplicando la misma regla de multiplicación que ya hemos visto, llegamos a:

$$z_3 = \frac{(3 + 4i) \cdot (5 - 2i)}{5^2 + 2^2}$$

$$z_3 = \frac{(15 - (-8)) + i(-6 + 20)}{5^2 + 2^2}$$

[6] Aunque el ejemplo se va a entender, más adelante, en breve, veremos qué es eso de conjugado.

$$z_3 = \frac{23 + 14i}{5^2 + 2^2} = \frac{23 + 14i}{29}$$

Donde el denominador siempre es real puro.

En su Forma exponencial, la multiplicación y la división son muy simples[7]:

A. Producto.

$$qe^{i\theta} \cdot re^{i\phi} = qre^{i(\theta+\phi)}$$

B. División.

$$\frac{qe^{i\theta}}{re^{i\phi}} = \frac{q}{r}e^{i(\theta-\phi)}$$

Otra operación que nos va a interesar es extraer el módulo del vector que representa al número complejo en el espacio mixto real/imaginario.

Para ello bastará con hacer Pitágoras con las cantidades reales dejando al margen i). Sin embargo, es interesante que introduzcamos aquí el concepto de conjugado de un número complejo. No es otra cosa que el mismo número complejo pero cambiando el signo de la operación.

[7] Por su tediosidad dejaremos la suma para un epígrafe de entretenimiento.

Si:

$$z = 3 + 4i$$

Su conjugado es[8]:

$$z^* = 3 - 4i$$

De esta manera, podremos definir:

$$|z| = \sqrt{zz^*}$$

$$|z| = \sqrt{(3 + 4i)(3 - 4i)}$$

$$|z| = \sqrt{(3 \cdot 3) + \big(3 \cdot (-4i)\big) + (4i \cdot 3) + \big(4i \cdot (-4i)\big)}$$

$$|z| = \sqrt{9 - 12i + 12i - 16i^2}$$

$$|z| = \sqrt{9 + 16} = \sqrt{25} = 5$$

Nota:

Téngase en cuenta esta sucesión de potencias de i

$$i = \sqrt{-1}$$

$$i^2 = (\sqrt{-1})^2 = -1$$

$$i^3 = \big(\sqrt{-1}\big)^3 = -\sqrt{-1} = -i$$

$$i^4 = \big(\sqrt{-1}\big)^4 = +1$$

...

[8] Se marca poniendo un asterisco como superíndice.

Hagamos un par de problemas para afianzar estos conceptos a pesar de que no tienen dificultad alguna.

Imaginemos que queremos hallar un número complejo que satisfaga la siguiente igualdad:

$$z^3 = 1$$

Es decir:

$$(x + yi)^3 = 1$$

Ok. Lo primero que haremos es expandir la potencia:

$$x^3 + 3x^2(yi) + 3x(yi)^2 + (yi)^3 = 1$$
$$x^3 + 3x^2yi + 3xy^2i^2 + y^3i^3 = 1$$

$$x^3 + 3x^2yi + 3xy^2(-1) + y^3(-i) = 1$$

$$x^3 + 3x^2yi - 3xy^2 - y^3i = 1$$

Agrupemos:

$$(x^3 - 3xy^2) + (3x^2y - y^3)i = 1$$

Para que $z^3 = 1$, es necesario que la parte real sea igual a 1 y la parte imaginaria sea igual a 0 ya que $1 = 1 + 0i$.

Para ello es necesario que:

$$(x^3 - 3xy^2) = 1$$
$$(3x^2y - y^3) = 0$$

Empecemos por $(3x^2y - y^3) = 0$

$$y(3x^2 - y^2) = 0$$

Esto puede ser cero en estos dos escenarios:

a. $y = 0$
b. $(3x^2 - y^2) = 0$

Vayamos por el camino a. Imaginemos que $y = 0$. Ahora retomemos la parte real: $(x^3 - 3xy^2) = 1$ y actuemos en consonancia:

$$(x^3 - 3xy^2) = 1$$
$$(x^3 - 3x0^2) = 1$$
$$x^3 = 1$$

Bueno, esto es una solución trivial. Ya lo sabíamos, pues si:

$$(x + yi)^3 = 1$$
$$(1 + 0i)^3 = 1$$

Obvio. El camino a. no nos sirve.

Tomemos el camino b.

$$(3x^2 - y^2) = 0$$

Esto implica que:

$$3x^2 = y^2$$

Retomemos la parte real:

$$(x^3 - 3xy^2) = 1$$

Y sustituyamos:

$$\left(x^3 - 3x(3x^2)\right) = 1$$

Desarrollemos:

$$x^3 - 9x^3 = 1$$

$$-8x^3 = 1$$

$$x^3 = \frac{1}{-8} = \frac{1}{-2^3} = -2^{-3} \rightarrow x = -2^{-1} = \frac{1}{-2}$$

Y, por lo tanto, sustituyendo en:

$$3x^2 = y^2$$

$$3\left(\frac{1}{-2}\right)^2 = y^2$$

$$\frac{3}{4} = y^2$$

$$y = \sqrt{\frac{3}{4}}$$

Por lo que el número complejo que estábamos buscando para satisfacer la igualdad: $z^3 = 1$, es:

$$z = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{3}{4}}i$$

Sólo un problema más y seguimos avanzando.

Imaginemos que nos piden un número complejo que satisfaga la siguiente igualdad:

$$z^2 = i$$

Es decir:

$$(x + yi)^2 = i$$

Expandamos:

$$x^2 + (yi)^2 + 2xyi = i$$

$$x^2 + y^2(i)^2 + 2xyi = i$$

$$x^2 - y^2 + 2xyi = i$$

Para que la igualdad se cumpla, es necesario que la parte real sea igual a cero, es decir:

$$x^2 - y^2 = 0$$

Y que en la única parte con componente imaginaria $2xyi = i$, suceda que:

$$2xy = 1$$

Así, puesto que hemos dicho que:

$$x^2 - y^2 = 0$$

$$x^2 = y^2$$

$$x = y$$

Y, sustituyendo en $2xy = 1$ colegimos que:

$$2y^2 = 1$$

$$y^2 = \frac{1}{2}$$

$$y = \pm\sqrt{\frac{1}{2}}$$

Y, por pura simetría, x es igual, por lo que el número que buscábamos era:

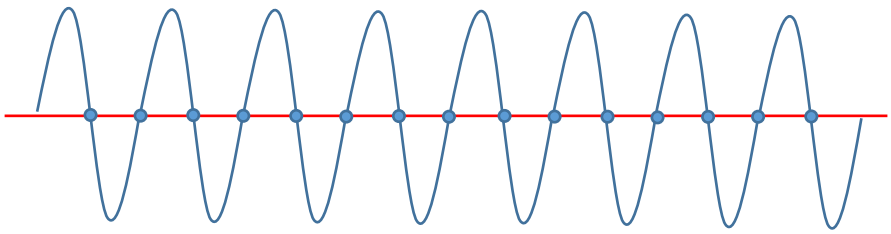
$$\left(\pm\sqrt{\frac{1}{2}} \pm \sqrt{\frac{1}{2}}i\right)^2 = i$$

Ahora, de nuevo, antes de cerrar este capítulo, preguntémonos: ¿por qué usar números complejos?

Imaginemos estos dos escenarios:

a. Una superficie de agua en calma:

b. Una superficie de agua agitada:



Ahora, en la segunda superficie, la sinusoidal fijémonos en los nodos, los puntos de intersección de la onda con el eje horizontal marcado en rojo. Sobre ellos podríamos decir que están en posición cero, es decir, a una altura vertical igual a cero.

¿Son estos puntos iguales, entonces, que todos los puntos iguales a cero en el caso (a)?

Diríamos que, en cierta medida sí pero, claro, en otra gran medida, no. Es decir, en el caso (b), efectivamente, los puntos están en $y = 0$ pero tienen una energía que inevitablemente va a hacer que pronto dejen de estar en dicha posición.

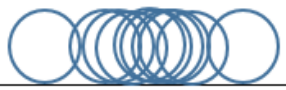
Justo en tal sentido, los números complejos, aportan dimensionalidad adicional a los números reales de manera que podemos encerrar, en la parte imaginaria, información que si sólo habláramos en términos de la parte real, perderíamos.

En una expresión compleja para describir la onda, en la parte real empaquetamos información sobre la posición del punto de la onda mientras que en la parte imaginaria empaquetamos información relativa al momento del punto. Más adelante veremos esto aplicándose y, por ello, con más claridad.

Probabilidad en Mecánica cuántica.

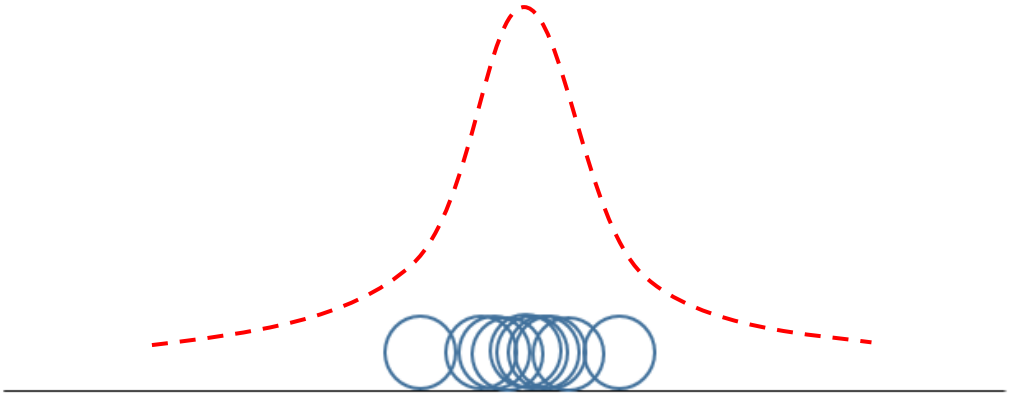
En el texto acerca de las Desigualdades de Bell[9] ya vimos que la función ψ nos definía un estado cuántico. En dicha función se recogerá la distribución probabilística de colapso de un sistema cuántico.

Dicha función funciona de manera similar a la siguiente. Imaginemos que estamos con un jugador de billar. Ponemos la bola blanca n veces en una posición y le pedimos n veces que golpee la bola blanca con la fuerza y dirección necesario como para ponerla en un lugar x. Efectivamente, por muy ducho que sea en el arte del billar, no siempre la pondrá exactamente en el mismo lugar x:



[9] Véase *Desigvaldades de Bell*. Iohannes Svlis.

Y si expresamos con una curva la distribución del número de ocasiones en que la bola ha estado en una determinada x, podríamos obtener algo parecido a esto:



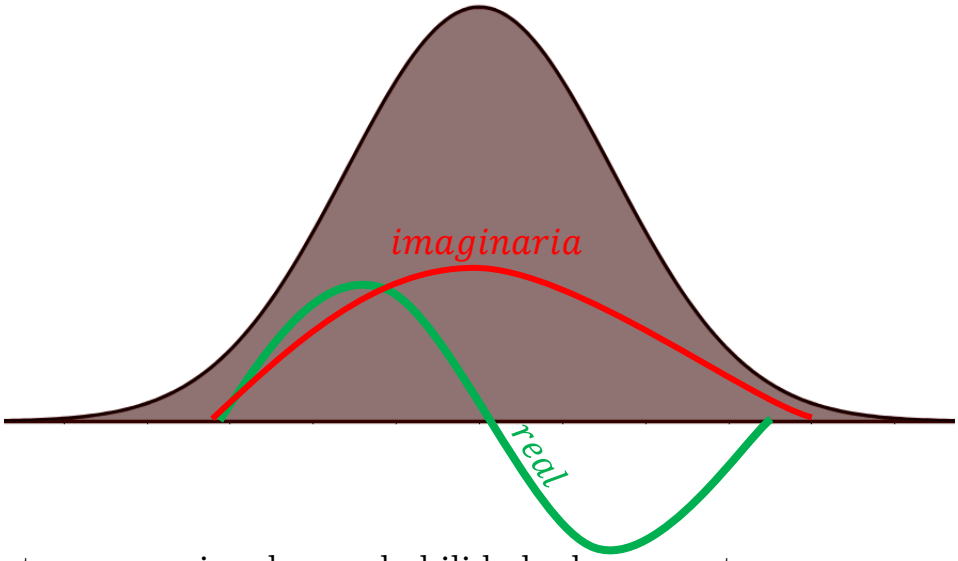
Decimos que dicha curva describe la distribución de casos y en el caso de la Mecánica cuántica, la probabilidad de que una partícula esté en un determinado lugar concreto viene dada por el cuadrado del valor absoluto de la función ψ.

$$|\psi_{(x)}|^2$$

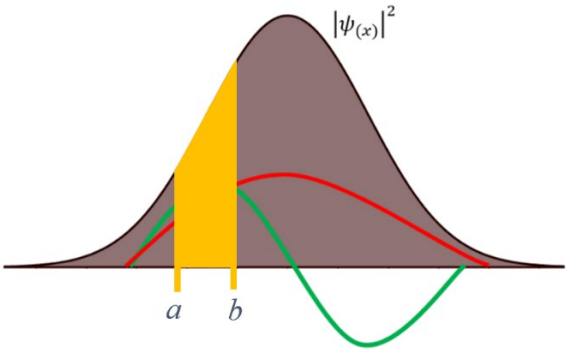
Esto nos suena mucho tras la lectura del texto acerca de las Desigualdades de Bell. Sin embargo, si bien allí, con fines didácticos, usábamos un ejemplo con número reales, ahora, que descendemos a la arena, usaremos números complejos.

Siendo esto así, habremos de dibujar la probabilidad total descrita por $|\psi_{(x)}|^2$ expresando la dualidad de naturaleza que tienen los números complejos: real e imaginaria:

$$|\psi_{(x)}|^2$$



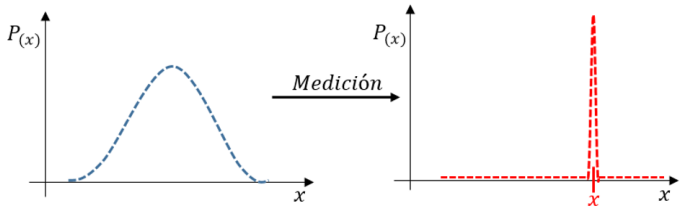
En este escenario, la probabilidad de encontrar una partícula comprendida entre los puntos a y b, quedará definida por el área que establece la integral en dicho rango:



$$Probabilidad = \int_a^b |\psi_{(x)}|^2 \, dx$$

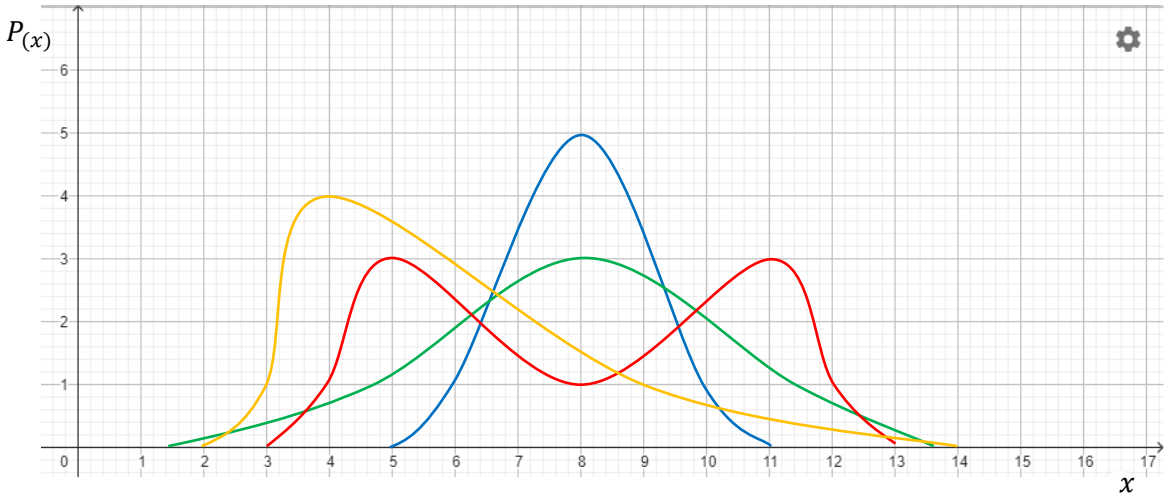
Donde $\psi_{(x)}$ es la función de onda[10].

[10] Es muy importante, absolutamente **fundamental**, comprender lo siguiente:



Inicialmente, antes del proceso de medición, la Función de onda de Schrödinger describe la curva de probabilidad de que encontremos una partícula en una posición espacial específica. Una vez efectuada la medida, el sistema *colapsa* y la partícula pasa a estar específicamente en un lugar concreto y la curva de distribución adopta la forma de la función δ de Dirac (más adelante veremos qué es esto).

Veamos ahora qué tipos de distribuciones podemos encontrarnos.



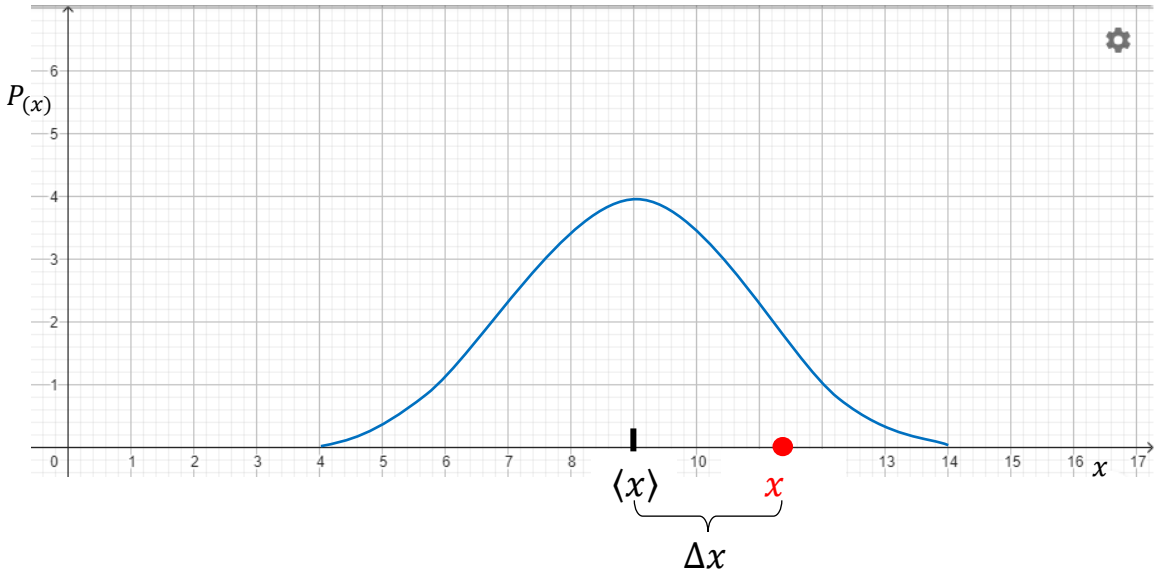
Tenemos en azul y verde curvas que representan Distribuciones normales en forma de Campana de Gauss si bien la diferente anchura que presentan cada una de ellas es debido a diferentes grados de incerteza. Tenemos también una Distribución bimodal con dos máximos (la roja) y una Distribución sesgada a la izquierda, la amarilla, que presenta, lo dicho, un cierto corrimiento hacia la izquierda. En todos estos casos, como hemos dicho, la suavidad de la

---

Es fundamental, como decimos, entender que no es que antes de la medida la partícula estuviera concretada en algún punto pero que, por falta de conocimiento o precisión epistemológica, sólo podíamos hablar de la probabilidad de encontrarla en el sitio que ya ocupaba. No, esto no es así. Antes de la medición, por decirlo de alguna manera, la partícula se hallaba *repartida* por todo el espacio según el modo definido por la Función de onda de Schrödinger y presentaba una determinada probabilidad, también definida por la misma función, de manifestarse en un punto, ahora sí, concreto tras la medición. A esto es a lo que se llama *colapso de la función de onda*. Insistimos: esto es muy importante, no sabemos por qué colapsa con mayor probabilidad aquí o allá, sencillamente, ontológicamente, la naturaleza se comporta así ante nuestros ojos. No es que la partícula esté aquí o allá y sólo la encontremos según una probabilidad. No, no es un problema epistemológico. La partícula se define ontológicamente mediante un procedimiento del que sólo conocemos la probabilidad de que suceda. Tras esta capa de probabilidad pueden existir mil causas aún ignotas que explicarían por qué la naturaleza se comporta así y, ojo, en este caso no estaríamos hablando de variables ocultas. Aquel debate queda definitivamente superado.
Es importante, también, considerar que el colapso de la Función de onda no se produce exclusivamente por la medición u observación de un ente inteligente. Nada más lejos de la realidad. La mera interacción del sistema definido por la función de onda de Schrödinger con otras partículas del entorno, o la misma constante gravitatoria, provocaría dicho colapso. No hay lugar para las teorías exóticas que se publican y publicitan de manera sensacionalista. Para pensar con más detalle sobre esto, véase op. cit. en la nota XXX.

pendiente en el ascenso y descenso desde el máximo representa un cierto grado de incertidumbre; un mayor grado de dispersión de los datos: a mayor suavidad, mayor incerteza.

Analicemos un poco el fenómeno de la dispersión de los datos. Supongamos esta distribución que tiene un valor medio esperado $\langle x \rangle$ y la distancia que hay hasta un dato x obtenido en una medición concreta de todas las realizadas:



Naturalmente, Δx es la distancia entre el punto medido y el valor medio esperado:

$$\Delta x = x - \langle x \rangle$$

Podríamos definir algo así como la distancia media esperada de todos los puntos al punto medio esperado y podríamos expresarlo así:

$$\langle \Delta x \rangle$$

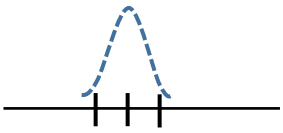
Pero, efectivamente, tal y como hemos representado este caso, si el punto medido x estuviera a la izquierda del valor medio esperado $\langle x \rangle$, obtendríamos una magnitud negativa, lo que sería inútil para los cálculos a realizar. Podríamos pensar en tomar, en tal caso, el valor absoluto de la distancia entre x y $\langle x \rangle$ pero ello dificultaría

enormemente el proceso de cálculo que tendremos que realizar y, siendo este punto una mera cuestión puramente instrumental y, ante la necesidad de contar con una magnitud positiva para nuestro trabajo, es mucho más operativo considerar el cuadrado de la distancia, es decir:

$$\langle \Delta x^2 \rangle$$

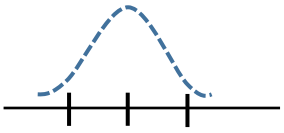
Veamos un ejemplo que nos haga visualizar aquello de lo que estamos hablando. Es muy simple. Imaginemos dos distribuciones de datos, A y B, como las siguientes:

$A: 1, 2, 3$



$\langle x \rangle = 2$
$\Delta x = -1,0,1$
$\langle \Delta x^2 = 1,0,1 \rangle$
$\langle \Delta x^2 \rangle = {}^{2}/_{3}$

$B: 0, 2, 4$



$\langle x \rangle = 2$
$\Delta x = -2,0,2$
$\langle \Delta x^2 = 4,0,4 \rangle$
$\langle \Delta x^2 \rangle = {}^{8}/_{3}$

Ciertamente, es simple ver que el grado de incertidumbre, de dispersión de los datos obtenidos en el caso B es mayor que en el caso A.

Ahora, una vez visualizado el concepto, podemos decir que hay un modo aún más simple de poder medir la Varianza:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

Parece lo mismo, pero no lo es. No es lo mismo el valor esperado de un dato al cuadrado que el cuadrado del valor esperado. Veámoslo y comprendamos porqué es más útil medirlo de esta manera.

Analicemos la siguiente expresión[11]:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta x^2 \rho_{(x)} dx$$

Como antes hemos convenido que:

$$\Delta x = x - \langle x \rangle$$

Podemos sustituir:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta x^2 \rho_{(x)} dx$$

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \langle x \rangle)^2 \rho_{(x)} dx$$

Expandamos:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (x^2 + \langle x \rangle^2 - 2x\langle x \rangle) \rho_{(x)} dx$$

Podemos integrar independientemente cada sumando:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \rho_{(x)} dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x \rangle^2 \rho_{(x)} dx - \int_{-\infty}^{+\infty} 2x\langle x \rangle \rho_{(x)} dx$$

Analicemos cada sumando. Primero:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \rho_{(x)} dx$$

[11] En la expresión es obvio que la probabilidad la altura desde el eje hasta $\rho_{(x)}$, multiplicada por cada diferencial dx desde $-\infty$ hasta $+\infty$ nos arrojará la probabilidad total de que un evento se produzca y que podemos normalizar en 1. Es decir: $\int_{-\infty}^{+\infty} A\rho_{(x)} dx$ es la probabilidad total, desde $-\infty$ hasta $+\infty$ de que obtengamos el valor A.

Esto es la probabilidad total de que obtenga el valor x^2, es decir: $\langle x^2 \rangle$.

Segundo:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \langle x \rangle^2 \rho_{(x)} dx$$

Puesto que $\langle x \rangle^2$ es un valor constante ya definido en el centro de nuestra curva, podemos sacarlo de la integral:

$$\langle x \rangle^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{(x)} dx$$

Y, puesto que lo que queda dentro de la integral, la probabilidad total, es igual a uno, este segundo sumando queda como: $\langle x \rangle^2$.

Tercero:

$$-\int_{-\infty}^{+\infty} 2x \langle x \rangle \rho_{(x)} dx$$

Podemos sacar del integrando las constantes $2\ y\ \langle x \rangle$, quedándonos:

$$-2\langle x \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho_{(x)} dx$$

Es decir, que obtenemos:

$$-2\langle x \rangle \langle x \rangle$$

$$-2\langle x \rangle^2$$

Ahora, volvamos agrupar los sumandos:

$$\langle x^2 \rangle + \langle x \rangle^2 - 2\langle x \rangle^2$$

$$\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

Es decir que, $Q.E.D.$, podemos usar la expresión que propusimos para los fines que hemos manifestado:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

Veamos un caso práctico para visualizar que esta expresión nos es perfectamente válida y, ahora lo veremos, muy útil. Supongamos esta distribución de datos recogidos[12].

x	$\Delta x = x - \langle x \rangle$	Δx^2	x^2
1	*-3*	*9*	*1*
2	*-2*	*4*	*4*
4	*0*	*0*	*16*
5	*1*	*1*	*25*
8	*4*	*16*	*64*
$\langle x \rangle = 4$ $\langle x \rangle^2 = 16$		$\langle \Delta x^2 \rangle = 6$	$\langle x^2 \rangle = 22$

Y ahora comparemos el valor obtenido para:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = 6 \rightarrow \sigma^2 = 6$$

Con el valor que obtendríamos calculando:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

$$\langle \Delta x^2 \rangle = 22 - 16 = 6$$

$$Q.E.D.$$

[12] Naturalmente en la columna gris obtenemos el valor esperado, el valor medio. Teniendo los valores propuestos el mismo grado de probabilidad, es decir: $^1/_5$, tenemos que:

$$\langle x \rangle = \sum_{i=1}^{5} x_i \cdot \rho \rightarrow \langle x \rangle = \sum_{i=1}^{5} x_i \cdot \frac{1}{i}$$

Donde ρ es la probabilidad de que salga un valor determinado. Así:

$$\langle x \rangle = 1 \cdot \frac{1}{5} + 2 \cdot \frac{1}{5} + 4 \cdot \frac{1}{5} + 5 \cdot \frac{1}{5} + 8 \cdot \frac{1}{5}$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{5} + \frac{2}{5} + \frac{4}{5} + \frac{5}{5} + \frac{8}{5}$$

$$\langle x \rangle = \frac{20}{5} = 4$$

Vamos, la media aritmética de toda la vida.

Al final de la columna verde tenemos la media de todas las distancias al cuadrado: $\langle \Delta x^2 \rangle = {}^{30}/_5 = 6$.

Al final de la columna naranja tenemos el valor promedio del cuadrado de los valores obtenidos para x, es decir: $\langle x^2 \rangle = {}^{110}/_5 = 22$.

Pero no sólo eso, sino que el procedimiento empleado nos aporta una magnífica herramienta. Recordemos el tipo de gráficas de distribuciones que anteriormente expusimos y analicemos la integral que antes hemos propuesto:

$$\int x\rho_{(x)}dx$$

Esto, ya lo hemos calculado antes, nos arroja el valor esperado para un conjunto de valores de x, es decir, la media: $\langle x \rangle$.

Pero, además resulta que:

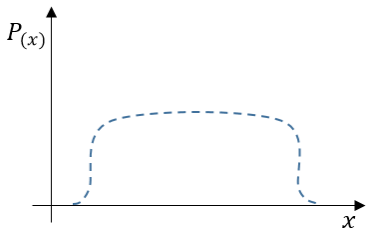
$\int x^2\rho_{(x)}dx \rightarrow$ Nos da información sobre la Varianza de la curva.

$\int x^3\rho_{(x)}dx \rightarrow$ Nos da información acerca del Sesgo de la curva.

$\int x^4\rho_{(x)}dx \rightarrow$ Nos da información acerca de la Curtosis[13] de la curva.

...

[13] La Curtosis hace referencia al carácter *mesetario* de una curva:



Toca ahora, para poder hacer una interpretación estadística de la función de onda $\psi_{(x)}$ que describa un estado cuántico, normalizar la probabilidad de la curva de distribución. Esto no es otra cosa que preparar la función para que su máximo resultado sea igual a 1.

En el caso de una función clásica que describa la densidad de probabilidad $\rho_{(x)}$ en un rango determinado, la normalización quedaría definida como:

$$\int_a^b \rho_{(x)} dx = 1$$

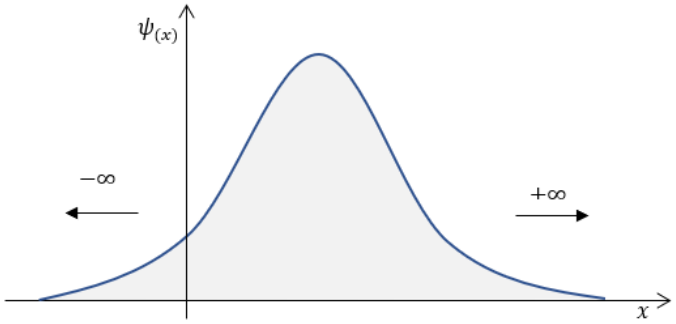
En el caso de $\psi_{(x)}$, entonces, sería:

$$\int_a^b |\psi_{(x)}|^2 dx = 1$$

Para que esto sea posible es necesario que la función cumpla un requisito: que su integral sea finita. Al ser finita, expresar una magnitud concreta, podremos dividir por una constante y normalizar a 1. Para ello, naturalmente, es necesario que $\psi_{(x)} \to 0$ cuando $x \to \pm\infty$[14]. ¿Podremos normalizar una función de onda $\psi_{(x)}$ que describa el estado de una partícula de naturaleza cuántica que cumpla la Ecuación de Schrödinger?

Vamos a verlo. Hablemos, antes, de la Ecuación de Schrödinger.

[14] Para que la función arroje un área finita, es necesario que se trate de *una curva cerrada sobre el eje x.*



La Ecuación de Schrödinger.

Recordemos la segunda ley de Newton:

$$F = m \cdot a$$

Que podemos reescribir como:

$$F = m \cdot \frac{dx_{(t)}}{dt}$$

Y como[15]:

[15] Recordemos que una Fuerza se puede definir como un vector que indica hacia dónde decrece la Energía Potencia. Aunque pueda sonar raro, no lo es en absoluto. Piénsese un minuto sobre ello y se verá claro. Si la fuerza se ejerce sobre una partícula que se mueve en una sola dimensión, por ejemplo, el eje Y (una partícula cayendo), es fácil intuir que la fuerza, que apunta hacia abajo, indica la dirección hacia a que decrece la Energía potencial de la partícula y que, además, se puede expresar como:

$$F = -\frac{dE_{POT}}{dy}$$

Si en vez de una sola dimensión, estamos ante un espacio de 3 dimensiones, lo que usaremos es el gradiente para estudiar el cambio en la Energía potencial en cada uno de los ejes:

$$\nabla F = -\nabla E_{POT} \rightarrow \left(\frac{\partial E_{POT}}{\partial x} + \frac{\partial E_{POT}}{\partial y} + \frac{\partial E_{POT}}{\partial z}\right)$$

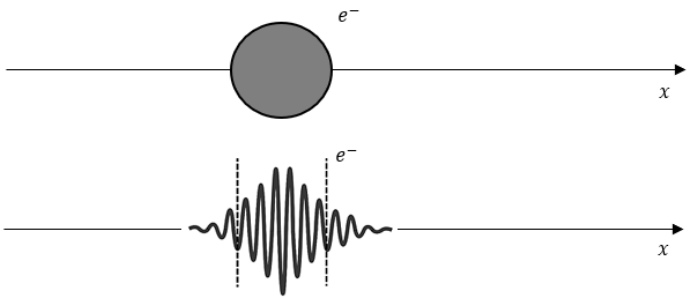
$$-\nabla E_{POT} = m \cdot \frac{dx_{(t)}}{dt}$$

Consideremos también el principio fundamental de Conservación de la energía según el cual la energía total de un sistema no se pierde, sino que se transforma.

$$E_{TOTAL} = E_{CINÉTICA} + E_{POTENCIAL}$$

Es decir, una partícula en movimiento (por ejemplo, que cae) va transformando energía potencial en energía cinética de manera que la energía total del sistema permanece constante.

Ahora bien, en el mundo a escala cuántica, como sabemos, las entidades no se comportan estrictamente como partículas sino, en todo caso, como entidades con naturaleza dual onda-corpúsculo. Los electrones[16], por ejemplo, son entidades que deben ser estudiadas como ondas y/o partículas.



Necesitamos añadir a nuestro enfoque sobre la naturaleza la dimensión ondulatoria. Recordemos la hipótesis de de Broglie según la cual todo corpúsculo material está dotado de una onda asociada que tiene una

[16] Los electrones son entidades perfectas para estudiar estos fenómenos porque cuentan con una masa muy pequeña y, además, podemos llegar a ralentizarlos mucho mediante la inducción de campos eléctricos o sumergiéndolos en hidrógeno líquido.

longitud de onda λ y un momento p que se relacionan según la siguiente expresión:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Donde, como hemos dicho: p es el momento (la cantidad de movimiento mv) y h la constante de Planck.

Recordemos que se define el número de onda como:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Que no es otra cosa que expresar el número de repeticiones de picos y valles de la onda expresado en radianes por unidad espacial. En definitiva es una medida análoga, espacial, de la frecuencia angular[17]: en este caso el número de radianes por unidad de distancia.

Podemos reescribir, usando ambas expresiones, como:

$$p = \frac{hk}{2\pi}$$

Y puesto que[18]:

$$\frac{h}{2\pi} = \hbar$$

Podemos expresar el momento de la onda como:

$$p = \hbar k$$

[17] La Frecuencia angular (ω) es 2π veces la frecuencia de la onda: $\omega = 2\pi F$.

[18] No es otra cosa que la constante de Planck normalizada a un ciclo de 2π radianes.

Con estas expresiones podríamos modelar una función que caracterizara la evolución una onda ante el cambio del espacio y el tiempo, es decir:

$$\psi_{(x,t)} = A\cos(kx - \omega t)$$

Esta función describe una onda plana[19], es decir, una onda que se propaga en una sola dirección.

Para incorporar la información que vamos a requerir para los estudios a escala cuántica, bastará con incorporar la dimensión imaginaria (recordemos el plano complejo):

$$\psi_{(x,t)} = A[\cos(kx - \omega t) + i\sin(kx - \omega t)]$$

$$\psi_{(x,t)} = A[\cos(\phi) + i\sin(\phi)]$$

Que podemos expresar exponencialmente como[20]:

[19] Matemáticamente, una onda plana es una solución de la ecuación de onda en su forma compleja (lo vamos a ver de inmediato):

$$u_{(\vec{x},t)} = Ae^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega t)}$$

dónde i es la unidad imaginaria, k es el vector de onda, ω es la frecuencia angular y A es la amplitud compleja. La solución física es usualmente encontrada tomando sólo la parte real de la expresión. Esta es la solución para una ecuación de onda escalar en un medio homogéneo. Para ecuaciones de onda vectoriales, como las que describen a la radiación electromagnética o las ondas en un medio elástico, la solución para un medio homogéneo es similar:

$$u_{(\vec{x},t)} = e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega t)}$$

multiplicado por un vector constante $\vec{a}$. Por ejemplo, en electromagnetismo, $\vec{a}$ es típicamente el vector para el campo eléctrico, campo magnético, o el potencial vectorial.
Una onda transversal es aquella en que el vector amplitud es ortogonal a k (por ejemplo, para ondas electromagnéticas en un medio isotrópico (de igual naturaleza en todas direcciones)), mientras que una onda longitudinal es aquella en que el vector amplitud es paralelo a k (por ejemplo en ondas acústicas propagándose en un gas o fluido).

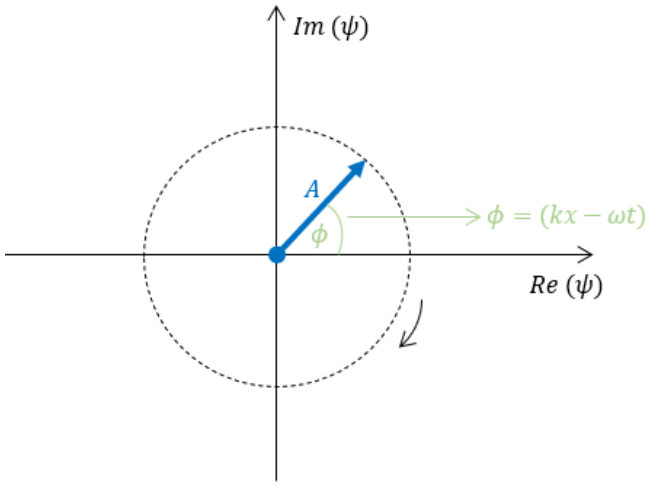
[20] Para ello basta con remitirnos a la famosa relación de Euler según la cual:

$$e^{i\phi} = \cos(\phi) + i\sin(\phi)$$

$$\psi_{(x,t)} = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

$$\psi_{(x,t)} = Ae^{i(\phi)}$$

Al añadir la componente imaginaria, podemos representar la evolución del coseno y seno en el plano complejo:



¿Será ésta una función candidata a satisfacer la Ecuación de Schrödinger? Ya lo veremos. Por el momento, sigamos.

Ahora traigamos de nuevo nuestra expresión sobre la conservación de la energía y multipliquémosla por nuestra función candidata:

$$(E_T = E_C + E_P) \cdot \psi$$

$$E_T\psi = E_C\psi + E_P\psi$$

Esta ecuación debe ser una ecuación diferencial en función del espacio y el tiempo para poder estudiar la evolución de ψ según cambian estas variables. ¿Qué podemos hacer?

Pocas líneas arriba, en la nota 19, hemos indicado que si nos quedamos sólo con la parte real de la función de onda propuesta, estamos ante

---

Cuando $x = \pi$ esta expresión puede escribirse como una de las más hermosas construcciones de la matemática: la Identidad de Euler.

$$e^{i\pi} + 1 = 0$$

una función de onda plana. Siendo esto así (olvidemos por un momento la componente imaginaria), traigamos, entonces, aquí, la ecuación de onda unidimensional:

$$\alpha^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 U}{\partial t^2}$$

Donde α es la velocidad de propagación de una onda material unidimensional y $U_{(x,t)}$ es el desplazamiento vertical, en un tiempo concreto t, de un punto cualquiera de dicha onda que, además, está fijada en los puntos $x = 0$ y $x = l$.

Veamos que se encierra aquí dentro:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

Supongamos que U es, precisamente, nuestra función candidata $\psi_{(x,t)}$:

$$\frac{\partial^2 \psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

Derivemos parcialmente:

$$\frac{\partial^2 \psi_{(x,t)}}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 A e^{i(kx-\omega t)}}{\partial x^2}$$

Es una exponencial, por lo que la derivada parcial permanece prácticamente como está a excepción de k e i, que son los únicos elementos relacionados con la x, y pasan, dos veces, del exponente a la base de la expresión.

$$\frac{\partial^2 \psi_{(x,t)}}{\partial x^2} = i^2 k^2 A e^{i(kx-\omega t)}$$
$$= -k^2 A e^{i(kx-\omega t)}$$
$$= -k^2 \psi_{(x,t)}$$

Pero como sabemos que:

$$p = \hbar k \rightarrow k = \frac{p}{\hbar}$$

Podemos sustituir:

$$\frac{\partial^2 \psi_{(x,t)}}{\partial x^2} = -= -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi_{(x,t)}$$

Y puesto que:

$$E_C = \frac{1}{2}mv^2 \quad y \quad p = mv$$

Y podemos decir que:

$$E_C = \frac{1}{2}m\frac{p^2}{m^2} \rightarrow p^2 = 2mE_C$$

Entonces:

$$\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi_{(x,t)}$$

$$\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} = -\frac{2mE_C}{\hbar^2}\psi_{(x,t)}$$

De donde podemos despejar $E_C \cdot \psi_{(x,t)}$:

$$E_C\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

Que podemos sustituir en:

$$E_T\psi = E_C\psi + E_P\psi$$

Quedándonos:

$$E_T\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + E_P\psi_{(x,t)}$$

Que, si nos fijamos en el término marcado en verde, observamos que sólo se deriva en función del espacio x y, por ello, es unidimensional. ¿Satisfará $\psi_{(x,t)}$ esta igualdad tan parecida a la de Schrödinger? Bueno, a priori hemos de observar que estamos hablando sólo de una onda plana, pues sólo estamos considerando la parte real (el coseno de ϕ que haya dentro de la función) y, además, por el momento, sigue siendo independiente del tiempo. De hecho podríamos decir que, con carácter general, la expresión:

$$E_T\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + E_P\psi_{(x,t)}$$

Es la expresión de la ley de la conservación de la energía de la Mecánica cuántica. Tratemos ahora de introducir el tiempo en nuestra expresión para ver cómo se comporta cuando consideramos la evolución de éste.

Supongamos que hemos encontrado una función ψ que satisfaga la anterior igualdad. En realidad sabemos, por supuesto, que es una función asociada a algo más que una onda plana pues, según estamos considerando, dicha función tiene componente compleja.

$$\psi_{(x,t)} = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

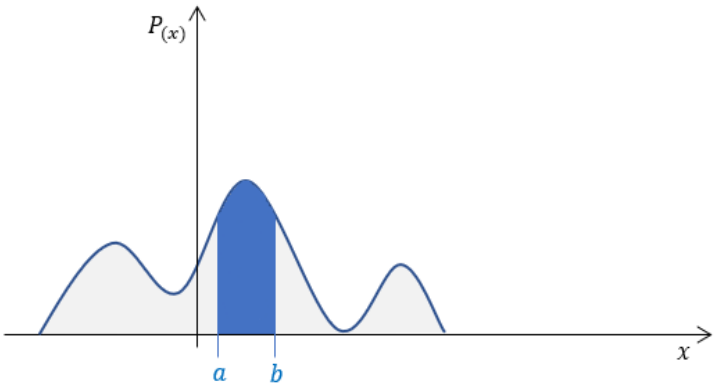
$$\psi_{(x,t)} = A[\cos(kx - \omega t) + i\sin(kx - \omega t)]$$

Hasta ahora hemos estado considerando sólo la parte real para hablar, con fines didácticos, de una onda plana. Sin embargo, si siguiéramos omitiendo la parte imaginaria, los resultados que obtendríamos no se corresponderían con los resultados experimentales. De hecho, cuando obtenemos toda la información útil contenida en la función es cuando procedemos a imponer su interpretación estadística elevando al cuadrado su valor absoluto:

$$\left|\psi_{(x,t)}\right|^2$$

De manera que, como ya sabemos, la probabilidad de que una partícula colapse en una región entre a y b en un tiempo t, queda definida como:

$$P_{(x)} = \int_a^b \left|\psi_{(x,t)}\right|^2 dx$$



Donde los picos representan la zona en la que mayor probabilidad hay de que colapse la partícula y, además, se define que es imposible encontrarla en un único punto, por ejemplo, a, ya que el área en un solo punto diferencial es igual a cero. Es decir, cuando calculamos la probabilidad de colapso de una partícula, lo hacemos para una región.

Pero, claro, para poder compatibilizar estas dos expresiones:

$$P_{(x)} = \int_a^b |\psi_{(x,t)}|^2 dx$$

$$E_T \psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + E_P \psi_{(x,t)}$$

Es necesario poder normalizarlas a 1 o, lo que es lo mismo, garantizar que la partícula va a colapsar, seguro, en algún lugar de la zona descrita por la función de onda. Es decir, es estrictamente necesario que:

$$P_{(x)} = \int_a^b |\psi_{(x,t)}|^2 dx = 1$$

Veamos como introducir esta condición en $\psi_{(x,t)}$ y que la igualdad de Schrödinger siga cumpliéndose. Para ello habrá que calcular la integral

anterior y determinar la amplitud A de la onda para garantizar que la función es normalizable y, por ello, compatible con la igualdad. Además hay que considerar que la probabilidad definida por la función de onda generalmente cambia con el tiempo por lo que hemos de introducir en la función de onda dicha amplitud A pero ésta no puede estar en función del tiempo. Así es como introduciremos el tiempo en la igualdad de Schrödinger que tenemos hasta ahora.

Naturalmente existen modos triviales de resolver esta igualdad como, por ejemplo:

$$\psi_{(x,t)} = 0$$

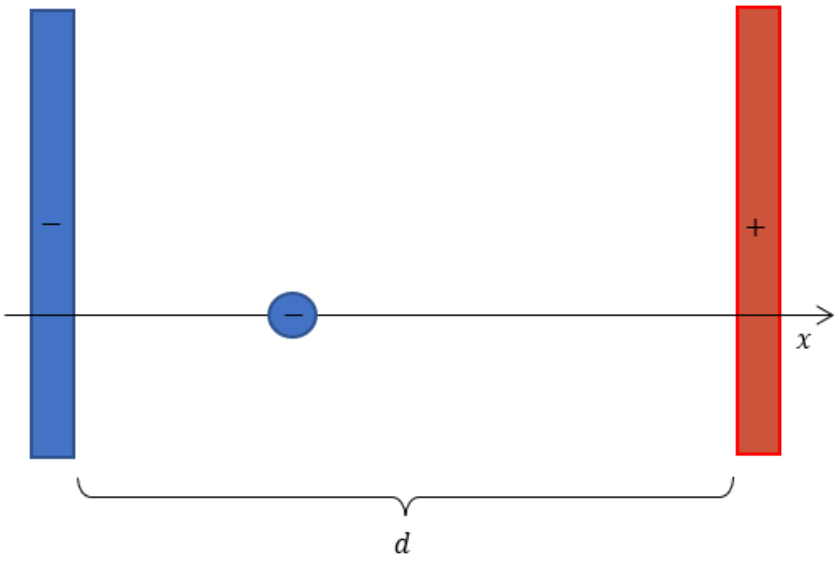
$$E_T\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + E_P\psi_{(x,t)}$$

En cuyo caso:

$$E_T\psi_{(x,t)} = E_P\psi_{(x,t)}$$

Pero, como hemos dicho, esto no nos dice nada, es trivial. Llamamos función cuadrática integrable a toda función que cumpla estos requisitos de normalización.

Veamos visualmente por qué necesitamos normalizar la función de onda. Imaginemos un electrón que viaja en un capacitor una distancia d de una placa a otra a causa de una diferencia de potencial entre ambas:



Analicemos el movimiento de este electrón mediante nuestra función de onda que, de momento, seguiremos dejando que siga siendo unidimensional (sólo se mueve en x):

$$\psi_{(x,t)} = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

Podríamos estar seguros, al 100 %, de que el electrón estará en algún lugar entre los dos electrodos: entre 0 y d. Es decir:

$$P_{(x)} = \int_0^d \left|\psi_{(x,t)}\right|^2 dx = 1$$

Ello implica que necesariamente:

$$\left|\psi_{(x,t)}\right|^2 = \left|Ae^{i(kx-\omega t)}\right|^2$$

Y esto es un paso muy importante ya que estamos hablando de la magnitud de un vector y, para poder calcularlo, tenemos que empezar a tomar la parte imaginaria de nuestra función de onda.

Podemos reescribir como:

$$\left|\psi_{(x,t)}\right|^2 = |A|^2 \cdot \left|e^{i(kx-\omega t)}\right|^2$$

Y resulta que esta expresión siempre es igual a 1[21].

$$\left|e^{i(kx-\omega t)}\right|^2 = 1$$

Por lo que:

$$\left|\psi_{(x,t)}\right|^2 = |A|^2$$

Como siempre va a ser positivo:

$$\left|\psi_{(x,t)}\right|^2 = A^2$$

Sustituyamos ahora:

$$P_{(x)} = \int_0^d \left|\psi_{(x,t)}\right|^2 dx = 1$$

$$P_{(x)} = \int_0^d A^2\, dx = 1$$

Pero como A es una magnitud independiente de x, podemos sacarla de la integral como una constante respecto a x:

$$P_{(x)} = A^2 \int_0^d dx = 1$$

Si resolvemos:

---

[21] Recordemos que: $e^{i(kx-\omega t)} = e^{i\phi} = \cos(\phi) + i\sin(\phi)$

Que, naturalmente, es un número complejo con estructura: $a + ib$

Y recordemos que, para calcular la magnitud de un vector complejo, bastaba con hacer: $|z| = \sqrt{zz^*}$

Es decir, que podemos calcular:

$$\left|e^{i\phi}\right| = \sqrt{[\cos(\phi) + i\sin(\phi)] \cdot [\cos(\phi) - i\sin(\phi)]}$$

$$\left|e^{i\phi}\right| = \sqrt{(\cos^2(\phi) + \sin^2(\phi)}$$

$$\left|e^{i\phi}\right| = \sqrt{1} = 1$$

Para todo $\phi \in \mathbb{R}$.

$$P_{(x)} = A^2 \left[x\right]_0^d = A^2[d-0] = A^2 d$$

De donde podemos despejar la amplitud:

$$A = \frac{1}{\sqrt{d}}$$

Con lo cual, ya podríamos normalizar nuestra función de onda originaria:

$$\psi_{(x,t)} = \frac{1}{\sqrt{d}} e^{i(kx-\omega t)}$$

De esta manera, una vez se hubiera encontrado una función de onda que satisficiera la Ecuación de Schrödinger, no sólo conoceríamos la función sino que podríamos encontrar muchas otras magnitudes como la posición media $\langle x \rangle$, el momento medio $\langle p \rangle$, la velocidad media $\langle v \rangle$ o la energía cinética media $\langle E_c \rangle$. Es decir, desde una función de onda dependiente de $x\ y\ t$ podemos deducir muchas otras magnitudes de manera análoga a como, en el mundo clásico, podemos extraer muchos datos desde un vector posición que está en función del tiempo t: $r_{(t)}$.

Sigamos extrayendo información de la Ecuación de Schrödinger en su versión independiente del tiempo que ya tenemos:

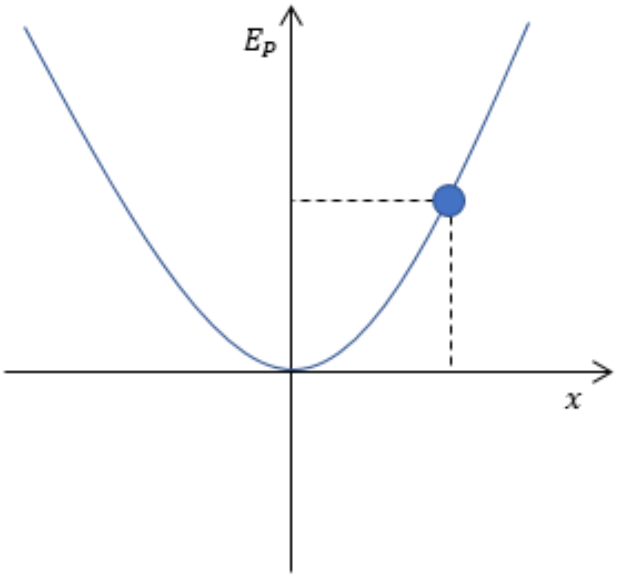
$$E_T \psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + E_P \psi_{(x,t)}$$

Reorganicemos los términos y juguemos un poco (que tampoco es mucho):

$$E_T \psi_{(x,t)} - E_P \psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

$$(E_T - E_P)\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

La Energía potencia es una expresión que suele expresarse comúnmente en función de la posición[22]. En principio, cualquier función podría describir, con dependencia de x, la energía potencial del sistema. Imaginemos que se trata de una función cuadrática, también llamada potencial armónico:



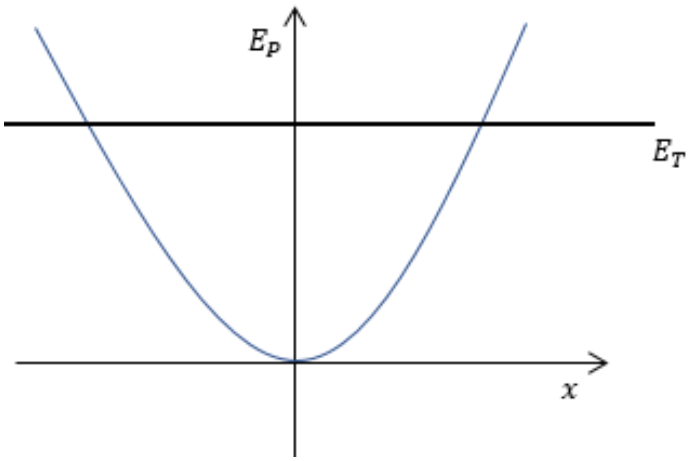
De manera que, mientras más lejos está del origen, más energía potencial tendrá la partícula.

En nuestra expresión:

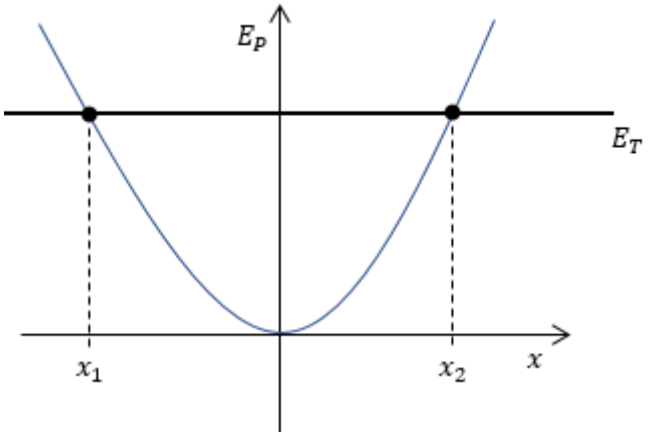
$$(E_T - E_P)\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

La energía total del sistema, E_T, debería permanecer constante con independencia de la posición de la partícula. De hecho, según sea su magnitud, establecerá un límite a la cantidad de energía potencial que pude acumular la partícula. Fijemos en nuestra gráfica dicho límite:

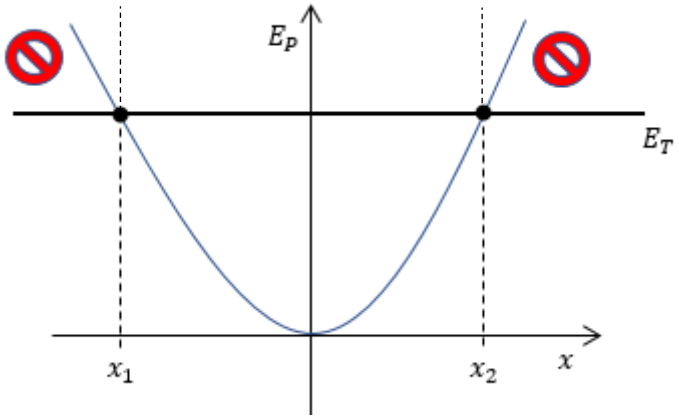
[22] Basta con imaginar la manzana que sacó a Newton de sus pensamientos.



Que interseccione con nuestra función de onda unidimensional en dos puntos:



Es obvio que en el paradigma de la Mecánica clásica, una partícula no podrá escapar de los límites establecidos por la energía total y, consecuentemente, por los puntos x_1 y x_2. Dentro de ese intervalo la partícula irá transformando energía potencial en cinética y viceversa. La zona de la función más allá de esos puntos le está prohibida:



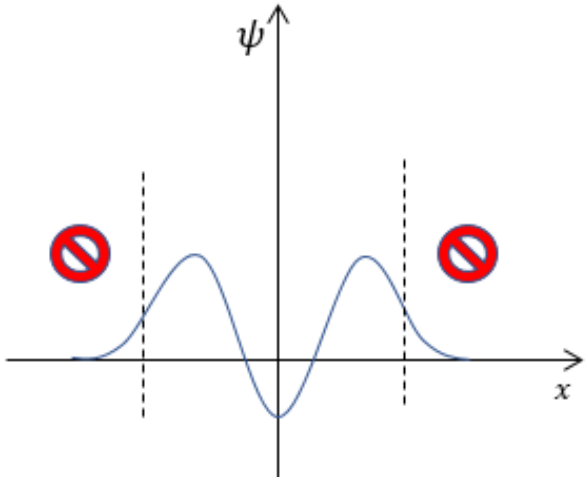
Si encontrásemos la partícula en alguna de las zonas prohibidas estaría sucediendo algo poco intuitivo: la energía potencial sería mayor que la energía total del sistema y consecuentemente, la energía cinética sería negativa:

$$E_T - E_P = E_C < 0$$

Y ninguna partícula clásica puede tener una energía cinética negativa a excepción, y aquí nos adentramos de nuevo en las extrañezas del paradigma cuántico, de una partícula con velocidad imaginaria. Una velocidad, claro, que no es física, que no es medible... en el paradigma clásico.

En el mundo clásico, desde luego, es imposible, pero ¿y en el paradigma cuántico?

Resulta que en la Mecánica cuántica no es raro encontrarse con curvas de distribución de probabilidad son diferentes a cero en la zona prohibida al paradigma clásico y en las que, naturalmente, existen posibilidades de que colapse una partícula[23].



[23] En este hecho se fundamenta el efecto de túnel cuántico.

Esto, como hemos dicho, es muy chocante para nuestra intuición pero la realidad es que los resultados experimentales muestran de manera contumaz que las partículas, a escala cuántica, presentan este comportamiento que implica, como ya hemos dicho, que la partícula pueda llegar a tener energía cinética negativa.

Para poder adaptarnos a la idea baste considerar que, como estamos viendo, en el paradigma cuántico gran parte de las medidas son medidas promedio y no medidas puntuales. Cuando nos acercamos a los límites de los promedios, pueden suceder cosas extrañas para nuestros hábitos intuitivos. De hecho, la energía cinética a escala cuántica no es exactamente una energía cinética tal y como la concebimos en el mundo macroscópico[24].

Teniendo esto en cuenta, echemos un nuevo vistazo a nuestra Ecuación de Schrödinger unidimensional dependiente sólo del espacio. Vamos a poder extraer de ella información muy interesante:

$$(E_T - E_P)\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

Analicemos los signos de los términos. Marcamos en verde aquello que consideramos positivo y en rojo aquello que consideramos negativo. Si estamos ante este escenario:

$$(E_T - E_P)\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

$\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$ esto debe ser negativo para que la igualdad se cumpla.

[24] Desarrollar.(30:13).

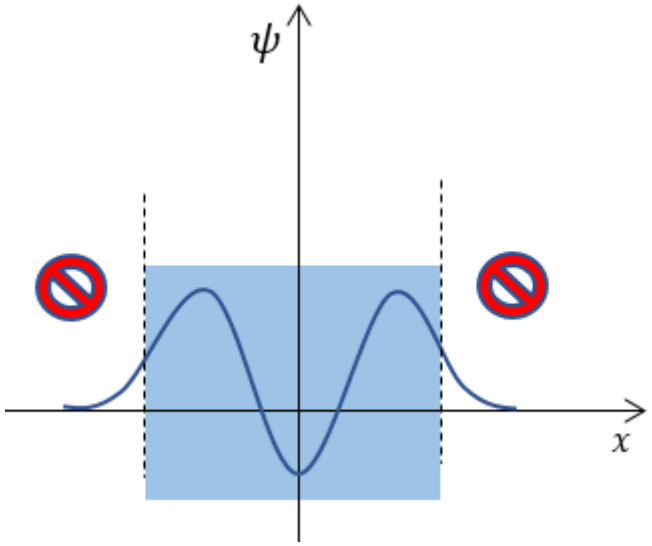
Y recordemos que la segunda derivada de una función nos daba información acerca de la curvatura cóncava o convexa de una función. En este caso, siendo este término negativo, la curva presentaría una curvatura de este tipo: ↷.

Otra posibilidad sería que:

$$(E_T - E_P)\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

$\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$ esto debe ser positivo para que la igualdad se cumpla y, siendo así, la función presentará una curvatura del tipo: ↺.

Estos dos escenarios, efectivamente, se corresponden con zonas en las que la energía presenta un comportamiento clásico ya que $(E_T - E_P) \geq 0$.



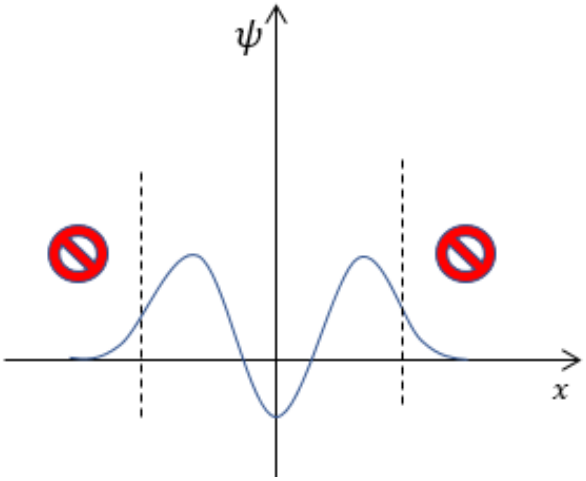
Pero, ¿y si miramos en las zonas prohibidas?, es decir, en aquellas en las que:

$$(E_T - E_P) < 0$$

Luego:

$$(E_T - E_P)\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

Sucederá al contrario que sucedía en el escenario clásico. Allí la función de onda y la derivada parcial segunda tenían signos diferentes. Ahora, en la zona prohibida, ambas expresiones deberán tener siempre el mismo signo. Ello implica que la curva descrita por la función sólo puede hacer dos cosas en la "zona prohibida": a. sea estrictamente creciente/decreciente y "subir/bajar" infinitamente o b. "Colapsar hacia cero" tal y como hemos recogido en nuestra gráfica:

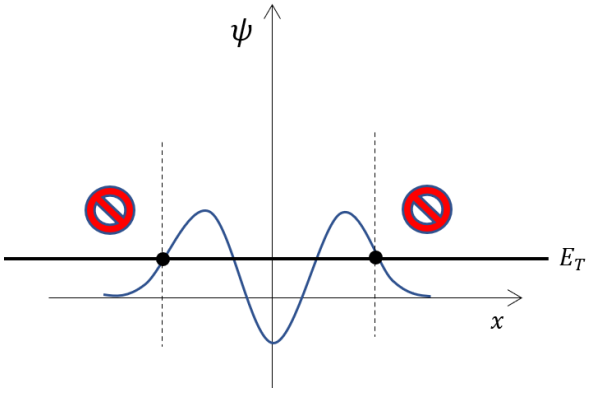


La opción a. queda descartada ya que, recordemos, estamos presuponiendo que $\psi_{(x,t)}$ es normalizable:

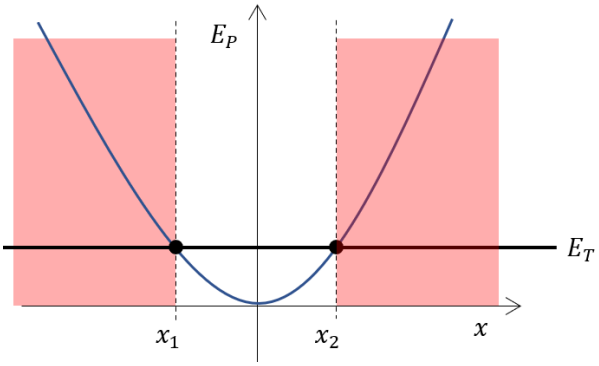
$$P_{(x)} = \int_0^d \left|\psi_{(x,t)}\right|^2 dx = 1$$

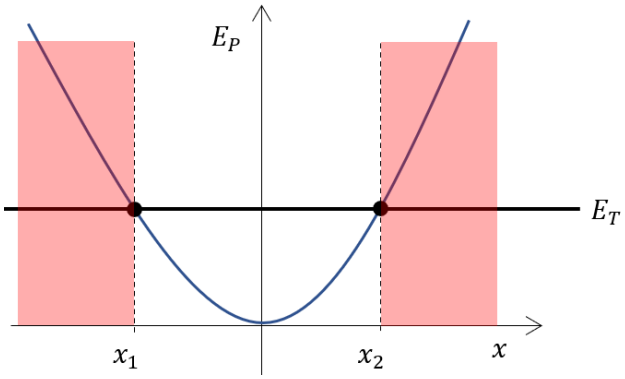
Así que la única opción es b.

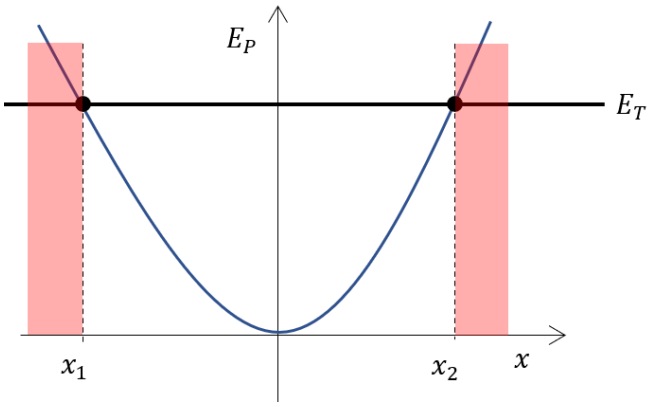
Pero además resulta que, como podemos ver en la gráfica, la zona en que puede pasar esto sucede en un punto de energía muy concreto:



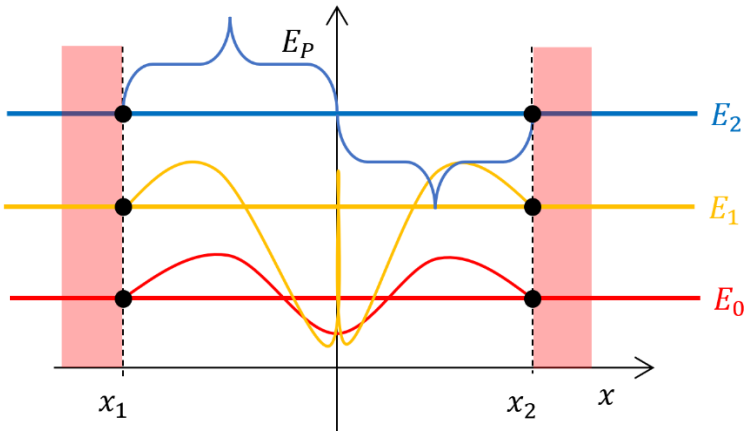
Es decir, sucede que las zonas se vuelven *prohibidas* para el paradigma clásico y, por lo tanto, sólo alcanzables desde la *extrañeza* cuántica en puntos muy concretos; en niveles de energía muy concretos, es decir, cuantizados, discretos.



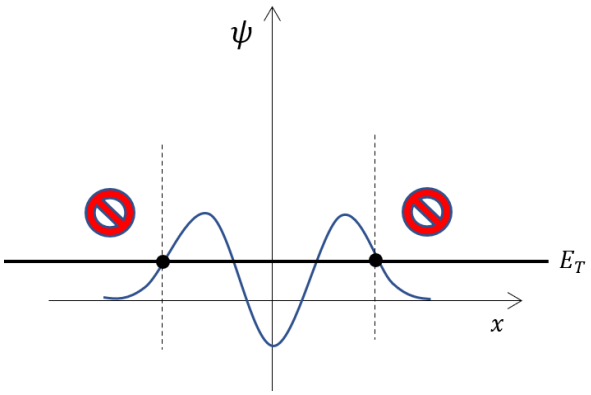




De manera que diferentes tipos ondas, de estados cuánticos, tendrán diferentes niveles de energía a la hora de entrar en las zonas prohibidas para el paradigma clásico y, además los saltos entre estos diferentes niveles no tendrán un carácter continuo sino discreto.



Así, en una función de onda cuya energía está definida como en este caso:



Donde el 100% de la probabilidad es normalizable e incorpora la suma de las dos zonas posibles de energía: la permitida y la no permitida por el paradigma clásico.

Pasemos nuestra expresión para una onda unidimensional independiente del tiempo:

$$E_T\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + E_P\psi_{(x,t)}$$

A una expresión para una onda tridimensional y aún independiente del tiempo:

$$E_T\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial \vec{r}^2} + E_P\psi_{(x,t)}$$

Es decir:

$$E_T\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial z^2}\right) + E_P\psi_{(x,t)}$$

Podemos sacar factor común:

$$E_T\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi_{(x,t)} + E_P\psi_{(x,t)}$$

Y simplificar esta expresión empleando la convención para el Operador nabla[25]:

$$E_T\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_{(x,t)} + E_P\psi_{(x,t)}$$

De donde podemos volver a sacar factor común[26]:

[25] Operador de Laplace.

[26] Podríamos optimizar aún más nuestra expresión sustituyendo por el operador Hamiltoniano:

$$E_T\psi_{(x,t)} = \hat{H}\psi_{(x,t)}$$

Hamiltoniano (eigenvalues / valores propios). Hemos expresado la ecuación de Schrödinger como eigenvalue; ecuación que debemos conocer del álgebra lineal. Imaginemos la aplicación del operador hamiltoniano como la aplicación de una matriz de transformación a una eigenfuncion (imaginémoslo como un eigenvector). Then you get the eigenvector psi again unchanged, escaled

$$E_T\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^2 + E_P)\psi_{(x,t)}$$

Y ahora empecemos a pensar que esta expresión no permanece constante en el tiempo porque $\psi_{(x,t)}$, ciertamente, es dependiente del tiempo porque, por ejemplo, la partícula que conforma nuestro sistema cuántico interactúa con su entorno modificando, así, su energía total. Introduzcamos, entonces, esta dependencia para llegar a la Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

Para simplificar el proceso imaginemos que la partícula estudiada no está imbuida en un campo externo y, así, no tiene energía potencial[27] (y volvamos también por el momento a una única dimensión x). En tal caso, podríamos decir que:

$$E_{T(t)} = E_{C(t)}$$

Si multiplicamos por $\psi_{(x,t)}$ en ambos lados tenemos:

$$E_{T(t)}\psi_{(x,t)} = E_{C(t)}\psi_{(x,t)}$$

Pero ya sabemos que:

$$E_{C(t)}\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

with the corresponding energyeigen value W. Through this eigenvalue problem you can mathematically see why the energy can be quantized in quantum mechanics. The energy eigenvalues depends on the Hamilton operator. This eigen values are discrete for most Hamilton operators that you will encounter.

[27] La partícula flota en un vacío perfecto.

Por lo que:

$$E_{T(t)}\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

Ahora, usemos la maravillosa magia de la matemática. Tomemos la derivada respecto al tiempo de la onda plana:

$$\psi_{(x,t)} = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

$$\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t} = -i \cdot \omega \cdot Ae^{i(kx-\omega t)}$$

Es decir:

$$\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t} = -i\omega\psi_{(x,t)}$$

En nuestro actual supuesto hemos dicho que no hay energía potencial alguna por lo que la energía total debe ser igual a la energía cinética, es decir que:

$$E_{T(t)} = E_{C(t)}$$

Esto lo podemos expresar como[28]:

[28] Véase nota 17: $\omega = 2\pi F$.
Sabemos que la constante de Planck es una relación de proporcionalidad entre el incremento mínimo de energía de un oscilador cargado eléctricamente y la frecuencia de a onda electromagnética asociada.

$$E = hF$$

$$E_{T(t)} = \hbar\omega$$

O como:

$$\omega = \frac{E_{T(t)}}{\hbar}$$

De manera que podamos decir que:

$$\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t} = -i\omega\psi_{(x,t)}$$

O, lo que es lo mismo:

$$\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t} = -i\frac{E_{T(t)}}{\hbar}\psi_{(x,t)}$$

Por ello:

$$E_{T(t)}\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t}$$

Siendo la frecuencia F:

$$F = \frac{\omega}{2\pi}$$

Podemos decir que:

$$E = \hbar\omega$$

Ahora, si hacemos lo siguiente:

$$E_{T(t)}\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{i}{i}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t}$$

$$E_{T(t)}\psi_{(x,t)} = -\frac{i\hbar}{i^2}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t}$$

$$E_{T(t)}\psi_{(x,t)} = -\frac{i\hbar}{(-1)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t}$$

$$E_{T(t)}\psi_{(x,t)} = i\hbar\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t}$$

Y si ahora recopilamos, para el caso supuesto de una partícula sin energía potencial:

$$E_{T(t)}\psi_{(x,t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

Podemos decir que:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

Que es, efectivamente, la Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una partícula sin energía potencial (y que se desplaza en una única dimensión, de momento).

Erwin Schrödinger asumió finalmente[29] que añadiendo una energía potencial dependiente del tiempo que multiplicara la función de onda $\psi_{(x,t)}$ podría completar de manera definitiva[30] una ecuación diferencial que permitiera buscar una función de onda que diera cuenta del estado

[29] Y los experimentos le dieron la razón.

[30] Para escenarios no relativistas. Más adelante lo veremos.

ondulatorio de una entidad cuántica de desplazamiento unidimensional (x) y dependiente del tiempo (t):

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + E_{P(x,t)}\psi_{(x,t)}$$

Que podemos generalizar a las tres dimensiones espaciales, sencillamente, intercambiando por el Operador de Laplace (Operador nabla):

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{(\vec{r},t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_{(\vec{r},t)} + E_{P(\vec{r},t)}\psi_{(\vec{r},t)}$$

Es decir, que la Ecuación de Schrödinger[31] queda como:

[31]Una propuesta de solución para encontrar la función de onda $\psi_{(x,t)}$ que satisfaga la Ecuación de Schrödinger podría abordarse separando variables dividiendo la ecuación diferencial inicial con dos ecuaciones diferenciales de una sola variable. Para ello tendremos que postular un caso en el que la energía potencial no dependa del tiempo. Siendo así podríamos separar la función $\psi_{(x,t)}$ en dos ecuaciones, una dependiendo sólo del espacio y otra dependiendo sólo del tiempo. Llamémoslas así:

$$\psi_{(x)}$$
$$\phi_{(t)}$$

Como la Ecuación de Schrödinger es lineal, podemos separar las variables y proponer una nueva combinación lineal de las mismas. Por ello pasemos a establecer que $\psi_{(x,t)}$ es el producto de estas dos subecuaciones:

$$\psi_{(x,t)} = \psi_{(x)}\phi_{(t)}$$

Es decir:

$$\psi_{(x,t)} = K_1\psi_{(x)}\phi_{(t)} + K_2\psi_{(x)}\phi_{(t)} + \cdots + K_n\psi_{(x)}\phi_{(t)}$$

Ahora tomemos la Ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + E_{P(x)}\psi_{(x,t)}$$

Y tomemos los elementos diferenciales por separado:

$$\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t} = \psi_{(x)}\frac{\partial\phi_{(t)}}{\partial t}$$

$$\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} = \phi_{(t)}\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2}$$

Sustituyamos:

Como las derivadas dejan de ser parciales, debemos reescribir las derivadas parciales como totales:

$$i\hbar\psi_{(x)}\frac{d\phi_{(t)}}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_{(t)}\frac{d^2\psi_{(x)}}{dx^2} + E_{P(x)}\psi_{(x)}\phi_{(t)}$$

Dividamos ahora por $\psi_{(x)}\phi_{(t)}$:

$$i\hbar\frac{1}{\phi_{(t)}}\frac{d\phi_{(t)}}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_{(x)}}\frac{d^2\psi_{(x)}}{dx^2} + E_{P(x)}$$

Son derivadas totales de funciones de una sola variable por lo que no es necesario especificarlas:

$$i\hbar\frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} + E_{P(x)}$$

Ahora recordemos que postulamos que la $E_{P(x)}$ no dependía del tiempo, es decir, que permanece constante respecto a él, por lo que podemos decir que:

$$i\hbar\frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dt} = E \rightarrow \frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dt} = \frac{E}{i\hbar} \rightarrow \frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dt} = \frac{i}{i}\frac{E}{\hbar} \rightarrow \frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dt} = \frac{iE}{i^2\hbar}$$
$$\frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar}$$

Procediendo de manera parecida, de la parte espacial podemos decir que puesto que el lado izquierdo es independiente de x lo podemos considerar constante respecto a x:

$$i\hbar\frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} + E_{P(x)}$$

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} + E_{P(x)}$$

Si multiplicamos en todos los miembros por ψ llegamos a una ecuación estacionaria independiente del tiempo y que sólo depende del espacio:

$$\psi E = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \psi E_{P(x)}$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{(\vec{r},t)}}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(\vec{r},t)}}{\partial\vec{r}^2}+E_{P(\vec{r},t)}\psi_{(\vec{r},t)}$$

Tenemos, entonces, dos ecuaciones diferenciales de una sola variable cada una, es decir, hemos simplificado esto:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}+E_{P(x)}\psi_{(x,t)}$$

En esto otro:

$$\frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dt}=-\frac{iE}{\hbar}$$

$$\psi E=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\psi E_{P(x)}$$

Que podemos resolver más fácilmente. Por ejemplo, para la ecuación dependiente del tiempo:

$$\frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dt}=-\frac{iE}{\hbar}\rightarrow\frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dt}dt=-\frac{iE}{\hbar}dt$$

$$\frac{1}{\phi}d\phi=-\frac{iE}{\hbar}dt$$

Integramos a ambos lados:

$$\int\frac{1}{\phi}d\phi=\int-\frac{iE}{\hbar}dt\rightarrow\int\frac{1}{\phi}d\phi=-\frac{iE}{\hbar}\int dt\rightarrow\ln(\phi)=-\frac{iE}{\hbar}t$$

$$\phi_{(t)}=e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

La normalización de la función de onda de Schrödinger.

Recordemos que estamos buscando una función de onda $\psi_{(x)}$ que cumpla los requisitos de la Ecuación de Schrödinger y que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_{(x)}|^2 dx = 1$$

Y recordemos también que para que esto sea posible es necesario que la función cumpla un requisito: que su integral sea finita y, al ser finita, podamos dividir por una constante y normalizar a 1. Para ello, naturalmente, es necesario que $\psi_{(x)} \to 0$ cuando $x \to \pm\infty$.

El mayor problema que nos encontramos es ¿cómo evoluciona esta función con el tiempo? Veámoslo, para ello estudiemos el cambio en función de t:

$$\frac{d}{dt}\int |\psi_{(x,t)}|^2 dx = ¿?$$

¿Qué podemos hacer con esto? Un par de cosas. La primera: podemos expresar esta magnitud (recordemos que es una función compleja) del siguiente modo:

$$\left|\psi_{(x)}\right|^2 = \psi^*_{(x,t)}\psi_{(x,t)}$$

Y lo segundo, y la única operación adicional que podemos hacer, es cambiar el orden de la integración y la derivación. Si antes teníamos:

$$\frac{d}{dt}\int\left(\psi^*_{(x,t)}\psi_{(x,t)}\right)dx$$

Es decir, primero se propone integrar y después derivar[32]. Vamos a proponer hacerlo al revés: introducir la derivación[33] en el integrando, derivar y, después, integrar.

$$\int\left[\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*_{(x,t)}\psi_{(x,t)}\right)\right]dx$$

Por la regla de la derivada del producto, esto es:

$$\int\left[\frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial t}\psi_{(x,t)} + \psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t}\right]dx$$

[32] Si integramos por x y resolvemos la operación sustituyendo x por los valores de los límites, estaremos de acuerdo en que ya no quedará nada en función de x, pues ya estará sustituido. Por eso la derivada externa por t es total: $\frac{d}{dt}$. Si lo hiciéramos al revés, es decir, introducir la derivada dentro del integrando, como la x aún estaría *activa*, la derivación respecto del tiempo debe ser parcial: $\frac{\partial}{\partial t}$.

[33] Véase nota anterior.

Recordemos ahora la Ecuación de Schrödinger (en su versión unidimensional):

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + E_P\psi_{(x,t)}$$

$$\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{i\hbar 2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + \frac{E_P\psi_{(x,t)}}{i\hbar}$$

$$\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t} = -\frac{i}{i}\frac{\hbar}{i2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + \frac{i}{i}\frac{E_P\psi_{(x,t)}}{i\hbar}$$

$$\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t} = i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} - i\frac{E_P\psi_{(x,t)}}{\hbar}$$

Y para su conjugado, podemos decir:

$$\frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial t} = -i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi^*_{(x,t)}}{\partial x^2} + i\frac{E_P\psi^*_{(x,t)}}{\hbar}$$

Y ahora podremos sustituir en nuestra expresión:

$$\int\left[\frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial t}\psi_{(x,t)} + \psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t}\right]dx$$

Del siguiente modo:

$$\int\left[\left(-i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi^*_{(x,t)}}{\partial x^2} + i\frac{E_P}{\hbar}\psi^*_{(x,t)}\right)\psi_{(x,t)} + \psi^*_{(x,t)}\left(i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} - i\frac{E_P}{\hbar}\psi_{(x,t)}\right)\right]dx$$

Si desplegamos el producto:

$$\int \left[-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi^*_{(x,t)}}{\partial x^2}\psi_{(x,t)} + i\frac{E_P}{\hbar}\psi^*_{(x,t)}\psi_{(x,t)} + \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}\psi^*_{(x,t)} - i\frac{E_P}{\hbar}\psi_{(x,t)}\psi^*_{(x,t)} \right] dx$$

Vemos que los términos señalados en rojo se cancelan y nos queda:

$$\int \frac{i\hbar}{2m}\left(-\frac{\partial^2\psi^*_{(x,t)}}{\partial x^2}\psi_{(x,t)} + \frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2}\psi^*_{(x,t)} \right) dx$$

Si nos fijamos, ya no tenemos derivación por el tiempo en ningún caso ya que nos quedan sólo segundas derivadas respecto a x, por lo que podemos reescribir como:

$$\int \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}\psi^*_{(x,t)} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)} \right) dx$$

Y como lo marcado en rojo es constante, podemos sacarlo del integrando y decir:

$$\frac{i\hbar}{2m}\int \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}\psi^*_{(x,t)} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)} \right) dx$$

Que por el Teorema fundamental del cálculo sabemos que se resuelve así[34]:

[34] Ponemos ahora el $\pm\infty$ que no hemos ido arrastrando por no ensuciar demasiado el desarrollo.

$$\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}\psi^*_{(x,t)} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}\right)\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}$$

Que es la forma que la probabilidad normalizada de la función de onda, dependiente del espacio y el tiempo, debe ser:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi_{(x)}\right|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}\psi^*_{(x,t)} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}\right)\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}$$

Pero sabemos, pues así lo hemos determinado previamente, que para que ψ sea normalizable debe suceder que:

$$\psi \to 0\ cuando\ x \to \pm\infty$$

Por lo que sucede que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi_{(x)}\right|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}\psi^*_{(x,t)} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}\right)\Bigg|_{-\infty}^{+\infty} = 0$$

Lo cual indica que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi_{(x,t)}\right|^2 dx = una\ constante$$

Que es justo lo que estábamos buscando ya que ello implica que la evolución del tiempo no afecta a la normalización de la función de

onda. Es decir que podemos tomar nuestra función de onda candidata a satisfacer la Ecuación de Schrödinger, normalizarla y no preocuparnos por la evolución del tiempo.

Veamos un ejemplo de normalización de función de onda.

Supongamos que tenemos una función de onda descrita del siguiente modo:

$$\psi_{(x)} = \begin{cases} 0 & \rightarrow \quad |x| > 1 \\ Ae^{ix} \cdot (1 - x^2) & \rightarrow \quad -1 < x < +1 \end{cases}$$

Podemos centrarnos exclusivamente en la parte que no está definida y estudiar:

$$\int_{-1}^{+1} \left| Ae^{ix}(1 - x^2) \right|^2 dx = 1$$

Sabemos que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \psi_{(x)} \right|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*_{(x)} \psi_{(x)} dx$$

Por lo que podemos reescribir nuestra expresión como (quitamos el = 1 hasta el final por no ensuciar):

$$\int_{-1}^{+1} \left(Ae^{-ix}(1-x^2)\right)\left(Ae^{ix}(1-x^2)\right)dx$$

$$\int_{-1}^{+1} A^2\left(e^{-ix}\cdot e^{ix}\right)(1-x^2)^2\,dx$$

$$A^2\int_{-1}^{+1}\left(e^{-ix+ix}\right)(1-x^2)^2\,dx \rightarrow A^2\int_{-1}^{+1}(e^0)(1-x^2)^2\,dx$$

$$A^2\int_{-1}^{+1}(1-x^2)^2\,dx \rightarrow A^2\int_{-1}^{+1}x^4+1-2x^2\,dx$$

$$A^2\int_{-1}^{+1}x^4\,dx+\int_{-1}^{+1}1dx-\int_{-1}^{+1}2x^2\,dx$$

$$A^2\left[\left(\frac{x^5}{5}\right)\Big|_{-1}^{+1}+(x)\Big|_{-1}^{+1}-\left(\frac{2x^3}{3}\right)\Big|_{-1}^{+1}\right]$$

$$A^2\left[\left(\frac{x^5}{5}\right)\Big|_{-1}^{+1}+(x)\Big|_{-1}^{+1}-\left(\frac{2x^3}{3}\right)\Big|_{-1}^{+1}\right]$$

$$A^2\left[\left(\frac{2}{5}\right)+2-\left(\frac{4}{3}\right)\right]=1\rightarrow A^2\frac{16}{15}=1\rightarrow A^2=\frac{15}{16}$$

$$A=\pm\sqrt{\frac{15}{16}}$$

Que es el valor que debe tener la constante A para que la función de onda sea normalizada.

Posición, velocidad, momento, operadores y otras hierbas.

Ya sabemos que, en el paradigma cuántico, no existe una definición exacta de aquello que pueda ser la posición o la velocidad. Hablaremos, en todo caso, de valores esperados: $\langle x \rangle, \langle v \rangle, \langle p \rangle, \ldots$ Los operadores, por otro lado, son las herramientas con las que podremos interconectar la función de onda con magnitudes físicas, digamos, clásicas.

¿Qué es el movimiento? ¿Qué clase de *movimiento* se está produciendo en una partícula de naturaleza cuántica?

En términos clásicos podemos imaginar que una partícula, en diferentes momentos, ocupa lugares diferentes trazando una trayectoria que podemos conocer compendiando todos los momentos. ¿Pero, sucede del mismo modo en el paradigma cuántico? Desde luego sabemos que no exactamente desde el momento en que no podemos someter a la función de onda de un sistema más de una vez a medición sin que ésta colapse y modifique su estado de manera permanente. No podemos medir la función de onda de un sistema en un tiempo $t = 0$ y esperar poder hacer lo mismo, sobre el mismo sistema, en los tiempos $t = 1, t = 2, t = 3, \ldots$

El único modo de abordar este problema es mediante el empleo de un conjunto de partículas que conforman, cada una de ella, sistemas que se han preparado para que sean idénticos. Medir en tiempos diferentes, en sistemas diferentes, aunque idénticos. Una sola medición por cada sistema y calcular, con el conjunto de datos, cómo puede evolucionar el valor esperado a lo largo del tiempo[35]: $\frac{d}{dt}\langle x\rangle$, es decir, cómo el pico de la densidad de probabilidad de colapso de una partícula evoluciona con el tiempo.

Entonces, ¿cuál es el valor esperado en cada sistema?

Sabemos que la densidad de probabilidad de que una partícula colapse es:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi_{(x,t)}\right|^2 dx$$

Y sabemos que el valor esperado para su posición x: $\langle x\rangle$, se puede definir como:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\rho_{(x)} dx$$

Donde $\rho_{(x)}$ es la función que define la densidad de probabilidad de un sistema. En nuestro caso: $\rho_{(x)} = \left|\psi_{(x,t)}\right|^2$, es decir que:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\left|\psi_{(x,t)}\right|^2 dx$$

[35] Esto no es la velocidad media sino la velocidad del punto medio.

O lo que es lo mismo:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi^*_{(x,t)} \psi_{(x,t)} dx$$

¿Y cómo estudiamos la velocidad? Es obvio:

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty} x \psi^*_{(x,t)} \psi_{(x,t)} dx$$

Procedamos, entonces, a hacer algunos cálculos:

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\partial}{\partial t}\left(x \psi^*_{(x,t)} \psi_{(x,t)}\right)\right] dx$$

La x, que naturalmente, no está en función de t (es la propia x), puede salir de la derivada parcial:

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \left[\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*_{(x,t)} \psi_{(x,t)}\right)\right] dx$$

Pero recordemos que en el capítulo anterior acabamos de ver que:

$$\int \left[\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*_{(x,t)} \psi_{(x,t)}\right)\right] dx = \int \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial \psi_{(x,t)}}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}\right) dx$$

Luego podemos sustituir en nuestra función:

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\left[\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*_{(x,t)}\psi_{(x,t)}\right)\right]dx$$

Quedándonos algo que se deriva parcialmente sólo en función de x:

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}\right)dx$$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} x\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}\right)dx$$

Que podemos integrar por partes[36]. Si establecemos lo que marcamos en azul, lo rojo también queda establecido a posteriori:

[36] Siempre que integro por partes me viene a la memoria el disco de Amon Düül:

$$\int udw = uw - \int wdu$$

Hagamos un poco de memoria por si acaso. Recordemos el orden preferente a la hora de asignar la u:

$$\begin{array}{lll} I & \rightarrow & Inversa \\ L & \rightarrow & Logarítmica \\ A & \rightarrow & Algebráica \\ T & \rightarrow & Trigonométrica \\ E & \rightarrow & Exponencial \end{array}$$

Y recordemos que dw sería todo lo demás que quedara (incluida la dx). Por ejemplo, para una integral de este tipo:

$$\int x^2 \cdot \ln x \ dx$$

$$u = x \qquad \rightarrow \qquad du = dx$$

$$dw = \frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}\right)dx \quad \rightarrow \quad w = \psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}$$

Y aplicando la regla:

$$\int udw = uw - \int wdu$$

esta integral:

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} x\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}\right)dx$$

Nos quedaría como:

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i\hbar}{2m}\left[x\left(\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}\right)dx\right]$$

Como sabemos que tanto $\psi_{(x,t)}$ como $\psi^*_{(x,t)}$ tienden a cero en $\pm\infty$, lo marcado en rojo se cancela:

Es obvio, por la norma *ILATE*, que la u debe ser el logaritmo y dw el resto. Una vez identificados, obtener dv y w es muy simple:

$$u = \ln x \quad \rightarrow \quad du = \frac{1}{x}$$

$$dw = x^2dx \quad \rightarrow \quad w = \frac{x^3}{3}$$

Y ahora procedemos a Amon Düül:

$$\int udw = uw - \int wdu$$

$$\int x^2\cdot\ln x\ dx = \ln x\frac{x^3}{3} - \int\frac{x^3}{3}\frac{1}{x}dx = \ln x\frac{x^3}{3} - \int\frac{x^2}{3}dx$$

$$\int x^2\cdot\ln x\ dx = \frac{x^3\ln x}{3} - \frac{x^3}{9}$$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i\hbar}{2m}\left[x\left(\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}\right)dx\right]$$

Y nos queda que:

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}\right)dx$$

Que podemos separar en dos integrales:

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}dx - \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}\psi_{(x,t)}dx\right]$$

Apliquemos de nuevo la regla de la integración por partes en la segunda integral (después veremos por qué nos conviene hacerlo así):

$$u = \psi_{(x,t)} \quad \rightarrow \quad du = \frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}$$

$$dw = \frac{\partial\psi^*_{(x,t)}}{\partial x}dx \quad \rightarrow \quad w = \psi^*_{(x,t)}$$

Ahora reescribamos nuestra integral:

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}dx - \left(\psi_{(x,t)}\psi^*_{(x,t)}\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}dx\right)\right]$$

Sabemos que lo marcado en rojo es necesariamente igual a cero (pues son funciones normalizables), luego nos queda:

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}dx - \left(-\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}dx\right)\right]$$

Es decir:

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}dx + \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}dx\right]$$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -\frac{i\hbar}{2m}\left[2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}dx\right]$$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}dx$$

Que es la velocidad esperada. A esto lo llamaremos *operador velocidad*[37]:

$$\langle\hat{v}\rangle = -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*_{(x,t)}\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial x}dx$$

Obviamente no es una distribución de probabilidad (no hay $\psi^*_{(x,t)}\psi_{(x,t)}$) sino, como hemos dicho, un *operador de expectativa*. Esta

[37] Atención al gorrito sobre la letra para los operadores.

tipología es la que van a tener muchos otros *operadores de expectativa* en Mecánica cuántica:

$$\langle \hat{v} \rangle = -\frac{i\hbar}{m} \int \psi^*_{(x,t)} \frac{\partial \psi_{(x,t)}}{\partial x} \, dx$$

$$\langle \hat{p} \rangle = -i\hbar \int \psi^*_{(x,t)} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_{(x,t)} \, dx$$

$$\langle \hat{x} \rangle = \int \psi^*_{(x,t)} \, x \, \psi_{(x,t)} \, dx$$

Como vemos, es interesante recoger que los operadores de las diferentes magnitudes tendrán formas como las que siguen[38]:

$$\hat{x} = x \cdot ALGO$$

$$\hat{v} = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial ALGO}{\partial x}$$

$$\hat{E}_{CIN} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 ALGO}{\partial x^2}$$

...

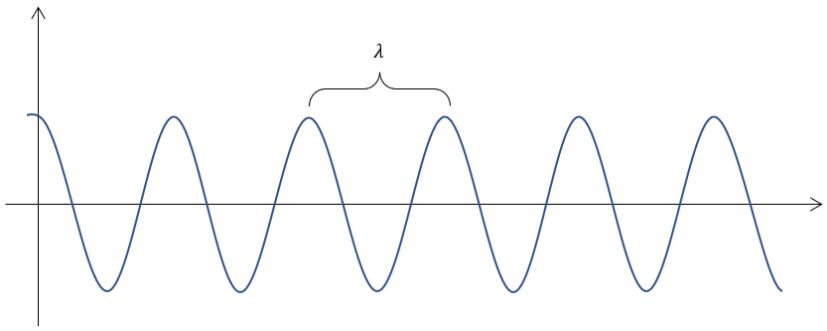
[38] Atención a que al no ser valores esperados, las integrales, claro, desaparecen.

El Principio de incertidumbre.

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$$

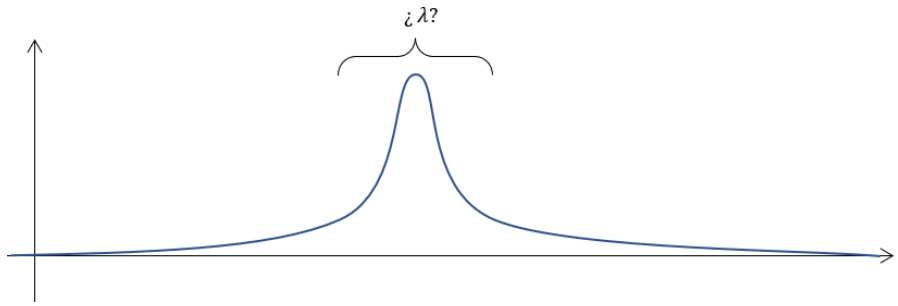
Para poder abordar el Principio de incertidumbre tendremos que hablar previamente de las ondas y sus interacciones y, también, del análisis de Fourier. No hay nada que temer, como todas las explicaciones recogidas en estos textos, será auto contenido.

Reflexionemos acerca de los conceptos posición y longitud de onda en una onda. Imaginemos que tenemos una onda sinusoidal homogénea propagándose en una dirección y que tomamos su longitud de onda:

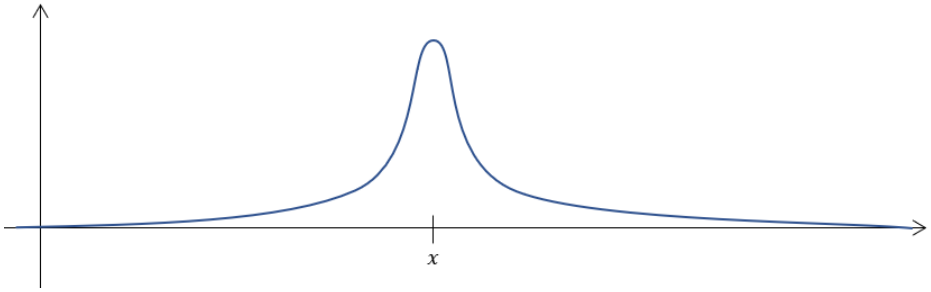


En principio no deberíamos encontrar ningún problema en poder dar una medida razonablemente precisa. Es más, podemos tomar medida de muchos *picos o valle*s y después dividir esa medida por el número de oscilaciones y tendremos una medida bastante precisa.

Imaginemos, en cambio, una onda con una tipología parecida a la siguiente:



¿Qué longitud de onda podemos medir ahí? Si bien en la primera onda no podíamos medir algo así como una posición, en esta segunda onda todo apunta a que, más que una longitud de onda, lo que tendremos que hacer es medir, con mayor o menor precisión, la posición del pico máximo de la onda:



Pero, realmente, la onda no sólo está ahí sino que la onda está, por decirlo de alguna manera, a lo largo de todo el eje x. Justamente, para

poder estudiar fenómenos ondulatorios, Joseph Fourier creó un método con el que abordar mediciones que presentaran esta dualidad. En términos generales (más adelante lo veremos con más detalle) Fourier proponía que existía una relación entre lo difuminado que estuvieran los *picos y valles* y su longitud de onda y la posición que se podía asignar a la onda:

$$\Delta\lambda\Delta x \geq 1$$

Que tiene las siguientes unidades:

$$\Delta\frac{1}{m}\Delta m \geq 1$$

Conectemos esto con la Teoría de las ondas pilotos de partículas materiales de Louis de Broglie[39] y que se estructura a través de tres ecuaciones fundamentales que ya conocemos porque hemos trabajado con ellas alguna vez:

$$E = mc^2$$
$$E = hF$$
$$c = F\lambda$$

A nada que juguemos un poco con estas ecuaciones, podemos llegar a:

[39] Véase *Desigvaldades de Bell*. Iohannes Svlis. Esto es, dicho de manera muy resumida, la dualidad onda-corpuscular a nivel atómico de la materia (matter waves).

$$mc^2 = hF$$

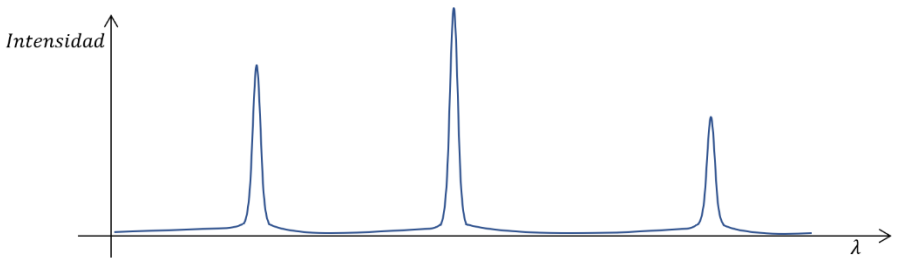
$$mc^2 = h\frac{c}{\lambda}$$

$$mc = \frac{h}{\lambda}$$

Donde el lado izquierdo de la ecuación es una masa por una velocidad, es decir, el momento:

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

De Broglie observó, analizando el espectro de emisión de radiación del átomo de Hidrógeno que ésta sólo se emitía en bandas de longitud de onda muy específicas:



Que sólo puede interpretarse como que el electrón *viaja* (más bien *está*) en torno al núcleo del átomo de Hidrógeno en forma de ondas: de ondas muy concretas con una longitud de onda muy determinada y que emiten radiación en una frecuencia de manera discreta y muy concreta.

Conectemos ahora el Principio de incertidumbre y la expresión del momento de la partícula onda-corpuscular al que hemos llegado empleando las fórmulas de De Broglie.

Si sabemos que el momento y la longitud de onda están relacionadas:

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

Y hemos dicho, por otro lado, que:

$$\Delta\lambda\Delta x \geq 1$$

Resulta que conjugando a Fourier y De Broglie podemos llegar a esbozar una rudimentaria expresión de incertidumbre para el cálculo del momento:

$$\Delta p\Delta x \geq \hbar/2$$

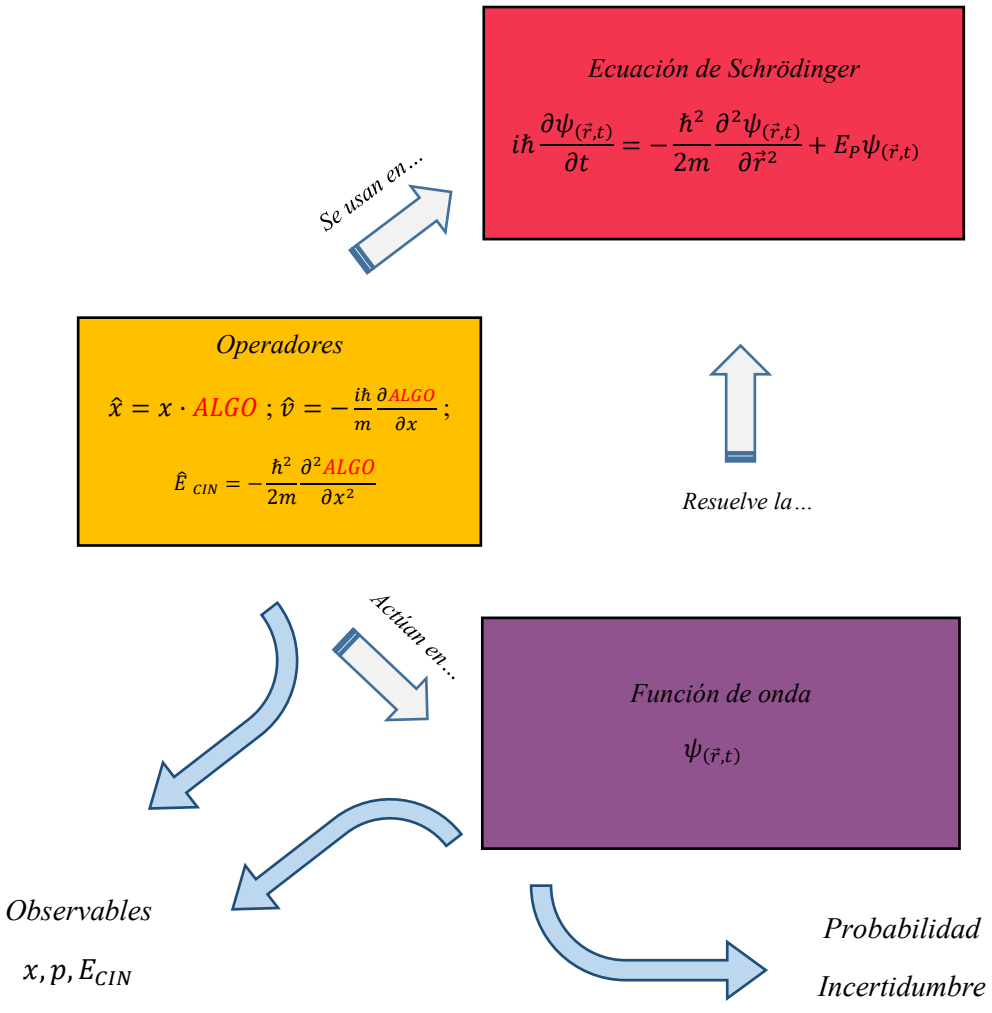
Y también podemos adelantar la incertidumbre de la energía y la evolución del tiempo del sistema[40]:

$$\Delta E\Delta t \geq \hbar/2$$

[40] Más adelante veremos esto en detalle.

Un descanso. Recapitulación y ordenación de lo visto.

Parémonos a pensar un poco en las cosas que hemos visto. En qué aportan y en qué papel desempeña cada una de ellas: 1) la Función de onda ψ, 2) la Ecuación de Schrödinger y 3) los Operadores.



Herramientas para la resolución de la Ecuación de Schrödinger.

Con carácter general podemos decir que existen dos grandes tipos de ecuaciones diferenciales: las ecuaciones diferenciales ordinarias y las ecuaciones diferenciales parciales.

Las ecuaciones diferenciales ordinarias son aquellas en las que se estudia el cambio de una o más funciones dependientes de una sola variable independiente como, por ejemplo, el tiempo (que es el que suele ser la mayor parte de las veces la variable independiente ya que es la que marca el ritmo de cambio de todas las demás variables clásicas).

Imaginemos varios observables clásicos que cambian de magnitud según evoluciona el tiempo. Por ejemplo, un tiro parabólico en dos dimensiones. Tendríamos una posición que se describiría mediante las funciones:

$$x_{(t)} \quad e \quad y_{(t)}$$

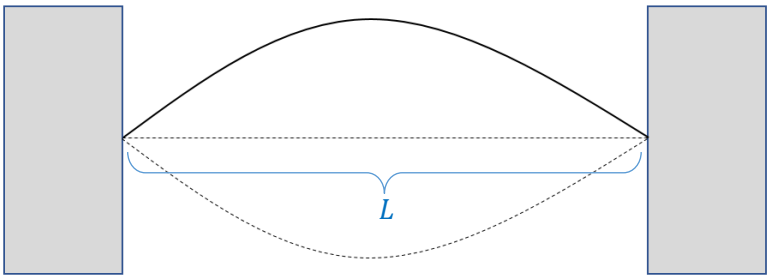
Y de ellas podremos definir una serie de nuevas funciones mediante el empleo de ecuaciones diferenciales ordinarias como, por ejemplo:

$$\frac{dx}{dt} = V_x \qquad y \qquad \frac{dy}{dt} = V_y$$

$$\frac{dV_x}{dt} = -KV_x \qquad y \qquad \frac{dV_y}{dt} = -KV_y - g$$

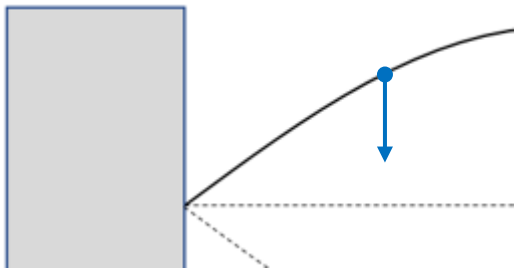
En el caso de las ecuaciones diferenciales parciales la cosa se complica un poco más. En este caso, las funciones implicadas en las ecuaciones son funciones dependientes de más de una variable como, por ejemplo, precisamente, nuestra función de onda ψ que es dependiente del espacio y del tiempo: $\psi_{(x,t)}$. Una de las metodologías más comunes para la resolución de este tipo de ecuaciones diferenciales y que es perfectamente aplicable a la Ecuación de Schrödinger es la separación de variables[41]. Veamos un ejemplo.

Imaginemos la cuerda de una guitarra. Ésta, como sabemos, está sujeta en dos sus extremos y, si la pulsamos, comienza a vibrar a una velocidad determinada según su longitud y tensión (es lo que aporta la tonalidad al sonido).

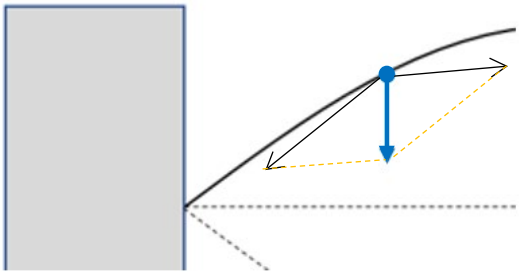


Si hacemos zoom a una parte cualquiera de la cuerda y nos fijamos en un punto concreto observamos que éste se desplaza arriba y abajo con una periodicidad determinada:

[41] Ya hemos propuesto un caso en la nota 31.



Y el vector que define este movimiento depende de curvatura y, por ende, de la tensión de la cuera hacia los dos puntos de anclaje:



Es decir, la aceleración de ese punto depende de una curvatura que depende de la tensión que, en definitiva, depende de la posición en que esté la cuerda y del momento en que la estudiemos (pues va cambiando con el tiempo a causa de la pérdida de energía). Una aceleración que depende de la posición respecto del tiempo, en concreto, la segunda derivada de la posición respecto al tiempo.

Sin ir más lejos, basta con que nos fijemos en la ecuación para el comportamiento ondulatorio que ya hemos visto y en la que se define la curvatura U en función de la posición y el tiempo[42]:

$$\frac{\partial^2 U_{(x,t)}}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 U_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

[42] La constante c^2 que se incluye en el lado derecho suele ser, efectivamente, la velocidad de la luz al cuadrado.

Estamos, entonces, ante una ecuación diferencial parcial lineal de segundo orden (segundas derivadas) que podemos tratar de resolver mediante el método de separación. Para ello, imaginemos que estamos ante una relación lineal en la que podemos separar un función $U_{(x,t)}$ dependiente de dos variables en el producto de dos funciones de una sola variable cada una:

$$U_{(x,t)} = X_{(x)}T_{(t)}$$

Sustituyamos:

$$\frac{\partial^2 X_{(x)}T_{(t)}}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 X_{(x)}T_{(t)}}{\partial x^2}$$

Esto, claro, podemos reformularlo así:

$$X_{(x)} \frac{\partial^2 T_{(t)}}{\partial t^2} = c^2 T_{(t)} \frac{\partial^2 X_{(x)}}{\partial x^2}$$

Si ahora dividimos por $X_{(x)}T_{(t)}$ en los dos lados (y nos llevamos c^2 al término izquierdo[43]):

$$\frac{1}{c^2 T_{(t)}} \frac{\partial^2 T_{(t)}}{\partial t^2} = \frac{1}{X_{(x)}} \frac{\partial^2 X_{(x)}}{\partial x^2}$$

[43] Por pura comodidad en los cálculos nos va a interesar tener la expresión de $X_{(x)}$ lo más simplificada posible.

De manera que en cada lado tenemos ya expresiones sólo en función de una sola y misma variable. Además, decimos que los dos términos son iguales. Es decir, estamos ante un escenario de este tipo:

$$f_{(t)} = g_{(x)}$$

Pensemos acerca de qué nos está diciendo esto. Arrojando ambas funciones el mismo resultado y siendo cada una de ellas dependientes de diferentes variables independientes, necesariamente debe producirse que $f_{(t)}$ no se vea afectada por el cambio en x y viceversa para $g_{(x)}$. Esto sólo puede producirse si la relación entre ambas funciones es constante: o son lo mismo, o están relacionadas mediante un coeficiente de relación constante[44]. Llamemos a esa constante K:

$$\frac{1}{c^2 T_{(t)}} \frac{\partial^2 T_{(t)}}{\partial t^2} = K$$

$$\frac{1}{X_{(x)}} \frac{\partial^2 X_{(x)}}{\partial x^2} = K$$

Y despejemos la parte diferencial de cada una de ellas:

$$\frac{\partial^2 T_{(t)}}{\partial t^2} = c^2 T_{(t)} K$$

$$\frac{\partial^2 X_{(x)}}{\partial x^2} = X_{(x)} K$$

[44] Por fines didácticos no lo vamos a incluir inmediatamente, sino que lo haremos un poco más adelante.

Si nos fijamos un poco en la tipología de estas dos ecuaciones, debería sonarnos de algo. ¿Qué tipo de funciones se quedan exactamente igual tras derivar dos veces? La exponencial[45].

Sigamos, de todas formas, el procedimiento completo para la resolución de este tipo de ecuaciones diferenciales. Para simplificar un poco el desarrollo tomemos esta convención:

$$\frac{\partial^2 T_{(t)}}{\partial t^2} = T_{(t)}K \rightarrow T''_{(t)} = T_{(t)}K$$

$$\frac{T''_{(t)}}{c^2 T_{(t)}} = K$$

[45] En estos casos siempre, siempre, se me viene a la cabeza el chiste friki de la fiesta de los números. Están todos los números metidos en un local haciendo una fiesta salvajísima. π está desfasadísimo entrándole a todo bicho que se menea (tiene fama de mujeriego); ϕ, siempre tan correcto, esta vez ha vomitado ya dos veces sobre la camarera; $\sqrt{2}$ está bailando como loco, …, vamos, una juergaka en toda regla. Sin embargo, en un esquina, solitario y lloroso, está el número e. A todo esto, i, que es un tipo muy imaginativo y especial, se acerca a e y le dice: "Venga tío, perra, no seas así, coño. ¡Intégrate!". Y e, cabizbajo, le dice: "¿Para qué, si va a ser lo mismo?". ¡Taduuum!¡Plas! Esto quiere decir que, con toda probabilidad:

$$X_{(x)} = e^{\sqrt{K}x}$$

$$T_{(t)} = e^{\sqrt{\frac{K}{c^2}}t} \rightarrow T_{(t)} = e^{\frac{\sqrt{K}}{c}t}$$

De manera que podremos expresar nuestra función:

$$U_{(x,t)} = X_{(x)}T_{(t)}$$

Como (ahora sí metemos la constante de normalización A que mencionábamos en la nota 43):

$$U_{(x,t)} = Ae^{\sqrt{K}x}e^{\frac{\sqrt{K}}{c}t}$$

¿Y dónde está la onda en esta expresión? Hemos de considerar que tanto a como A son dependientes de las condiciones iniciales o de frontera y, ambas tendrían componente imaginaria por lo que, finalmente, esta expresión tendrá la forma:

$$U_{(x,t)} = e^{i\omega t}$$

Que sabemos que es:

$$e^{i\omega t} = A[\cos(\omega t) + i\sin(\omega t)]$$

Ahí tenemos nuestra onda.

$$\frac{\partial^2 X_{(x)}}{\partial x^2} = X_{(x)}K \rightarrow X''_{(x)} = X_{(x)}K$$

$$\frac{X''_{(x)}}{X_{(x)}} = K$$

Ahora consideremos las condiciones de frontera, es decir, qué sucede en los extremos de la cuerda que están fijos a una distancia $x = 0$ (el punto izquierdo) y $x = L$ (el punto derecho). Acordemos, entonces, que nuestra función $U_{(x,t)}$ presenta estas dos condiciones de frontera[46]:

$$U_{(0,t)} = 0 \quad U_{(0,t)} = X_{(x)}T_{(t)} = 0 \quad \therefore X_{(0)} = 0$$

$$U_{(L,t)} = 0 \quad U_{(L,t)} = X_{(L)}T_{(t)} = 0 \quad \therefore X_{(L)} = 0$$

Y veamos las condiciones iniciales, es decir, el momento en que $t = 0$. Debemos tener en consideración que en dicho momento la cuerda de la guitarra no tiene por qué estar en reposo. Es perfectamente posible que empecemos a estudiarla cuando la acabamos de pulsar y ya se está moviendo. Siendo esto así tenemos dos condiciones iniciales:

$$U_{(x,0)} = f_{(x)}$$

Es decir, existe una función $f_{(x)}$ (en realidad $U_{(x,0)}$) que describe la posición de cada punto x $(0 < x < L)$ de la cuerda (onda) sobre/bajo la línea de equilibrio en el momento $t = 0$. Y, por otro lado:

[46] Siempre para un $T_{(t)} \neq 0$ ya que, si no, la solución sería trivial. Obviamente, en esos puntos $0\ y\ L$, $U_{(x,0)}$ será siempre igual a cero con independencia del tiempo, ya que están fijos. Por otro lado usamos ∴ como "por lo tanto, necesariamente… " en vez de la notación lógica al uso.

$$\frac{\partial U_{(x,t)}}{\partial t}\Big|_{t=0} = g_{(x)}$$

Que sería la velocidad que tiene un punto x de la onda en el momento $t = 0$.

Recapitulemos. Tenemos las siguientes herramientas para resolver nuestra ecuación diferencial[47]:

$$\begin{cases} \dfrac{X''_{(x)}}{X_{(x)}} = K \\ C.F^{48}. \rightarrow X_{(0)} = 0; X_{(L)} = 0 \\ \dfrac{T''_{(t)}}{c^2 T_{(t)}} = K \end{cases}$$

Es decir, estamos ahora ante dos ecuaciones diferenciales ordinarias. Como tenemos la parte de la $X_{(x)}$ más despejada, empecemos a trabajar en ella. Para ello busquemos su Polinomio característico[49]:

$$\frac{X''_{(x)}}{X_{(x)}} = K \Rightarrow X''_{(x)} = KX_{(x)} \Rightarrow X''_{(x)} - KX_{(x)} = 0$$

[47] Por el momento las condiciones iniciales no nos van a servir por lo que no las recogemos en esta primera recapitulación.

[48] Condiciones de frontera.

[49] Esto está más desarrollado en el texto *Apuntes de Filosofía física. Relatividad General*. Iohannes Svlis. De todas formas baste con recordar que una segunda derivada la recogemos como una variable cuadrática ya que es una ecuación diferencial lineal con coeficientes constantes.

Donde determinamos que[50]:

$$K = \lambda^2$$

Caben ahora tres posibilidades:

a. K es negativa, es decir: $K = -\lambda^2$, en cuyo caso obtendremos números complejos que nos llevan a soluciones trigonométricas (éste va a ser nuestro caso, claro, era de esperar si estamos hablando de ondas[51]).

b. K es cero, en cuyo caso obtendremos dos soluciones reales dobles.

c. K es positiva, es decir: $K = \lambda^2$, en cuyo caso nos encontraremos dos soluciones exponenciales reales multiplicadas por su correspondiente constante arbitraria[52].

Analicemos soluciones en el paradigma (a): K es negativa, es decir:

$$K = -\lambda^2 \text{ y } \lambda > 0$$

Siendo así, abordemos el problema general como un subproblema (a):

[50] Usamos λ^2 porque si usáramos a secas λ íbamos a tener que estar tratando con algo tan incómodo como $\sqrt{K}$.

[51] Véase nota 45.

[52] Véase nota 44. Más adelante la incorporaremos.

$$\begin{cases} \dfrac{X''_{(x)}}{X_{(x)}} = K \\ C.F. \rightarrow X_{(0)} = 0; X_{(L)} = 0 \\ \dfrac{T''_{(t)}}{c^2 T_{(t)}} = K \end{cases}$$

Vayamos primero con los términos en función de x:

$$\frac{X''_{(x)}}{X_{(x)}} = -\lambda^2$$

$$X''_{(x)} = -\lambda^2 X_{(x)}$$

$$X''_{(x)} + \lambda^2 X_{(x)} = 0$$

Sustituyamos ahora $X''_{(x)}$ por r^2 (para deducir el polinomio característico[53] se suele usar λ pero como ya está siendo usada empleamos r^2. Obviamente no hay r porque no hay $X'_{(x)}$ y λ está ligado a un término independiente, algo sin derivar):

$$r^2 + \lambda^2 = 0$$

$$r^2 = -\lambda^2$$

$$r = \pm\sqrt{-\lambda^2}$$

$$r = \pm\sqrt{-1\lambda^2}$$

$$r = \pm\lambda\sqrt{-1}$$

$$r = \pm\lambda i$$

[53] Véase nota 49.

Es decir, hay dos raíces complejas conjugadas. En casos justos como éste, el sistema fundamental de soluciones es una exponencial sin parte real (pues no la hay) y cosenos y senos multiplicados por λx (λ es la parte imaginaria de las raíces obtenidas)[54]. Y multiplicándolas y sumándolas por unas constantes arbitrarias obtendríamos esta solución:

$$X_{(x)} = K_1 \cos(\lambda x) + K_2 \sin(\lambda x)$$

Impongamos ahora las condiciones de frontera que conocíamos sobre la x, a saber:

$$X_{(0)} = 0; X_{(L)} = 0$$

En primer lugar $X_{(0)} = 0$ en $X_{(x)} = K_1 \cos(\lambda x) + K_2 \sin(\lambda x)$. Tendríamos:

$$X_{(0)} = K_1 \cos(\lambda 0) + K_2 \sin(\lambda 0)$$
$$0 = K_1 \cos(0) + K_2 \sin(0)$$

Esto es, por trigonometría elemental:

$$0 = K_1 \cdot 1 + K_2 \cdot 0$$

Para que esta igualdad se cumpla, necesariamente debe pasar que $K_1 = 0$[55]. Si sustituimos:

$$X_{(x)} = 0 \cdot \cos(\lambda x) + K_2 \sin(\lambda x)$$

[54] Véase nota 45 y recuérdese la identidad de Euler.

[55] Aún nos queda la posibilidad de que K_2 pueda ser distinta de cero.

Con lo que ya tenemos que:

$$X_{(x)} = K_2 \sin(\lambda x)$$

Empleemos ahora la siguiente condición de frontera $X_{(L)} = 0$ en $X_{(x)} = K_1 \cos(\lambda x) + K_2 \sin(\lambda x)$.

Como ya sabemos que:

$$X_{(x)} = K_2 \sin(\lambda x)$$

Sustituimos:

$$X_{(L)} = K_2 \sin(\lambda L)$$

$$0 = K_2 \sin(\lambda L)$$

Para que esta igualdad se cumpla, deben suceder una de estas dos cosas:

a. O que $K_2 = 0$, lo cual implicaría que $X_{(x)} = K_2 \sin(\lambda x) = 0$, es decir, que $\forall x$ la función sea igual a cero, cosa que descartamos pues sólo nos aporta una solución trivial para:

$$U_{(x,t)} = X_{(x)} T_{(t)}$$

Pues siendo $X_{(x)} = 0$, $U_{(x,t)} = 0$.

b. Que $\sin(\lambda L)$ sea igual a cero. Esto se cumple para todo $\lambda L = n\pi$ donde n es un entero positivo cualquiera (infinitas soluciones) ya que tanto λ, por imposición[56], como L, que es la longitud de la cuerda, son necesariamente positivos. Así:

[56] Véase inicio del subproblema en la página 89.

$$\lambda L = n\pi \rightarrow \lambda = \frac{n\pi}{L}, n = 1,2,3, \dots, +\infty$$

Luego para $x \neq 0$, tenemos que:

$$X_{(x)} = K_2 \sin(\lambda x)$$

Es:

$$X_{(x)} = K_2 \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Esta solución para $X_{(x)}$ nos permite avanzar ahora con el término en función de t. Retomemos el problema añadiendo lo que ahora ya sabemos:

$$\begin{cases} X_{(x)} = K_2 \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \\ C.F. \rightarrow X_{(0)} = 0; X_{(L)} = 0 \\ \frac{T''_{(t)}}{c^2 T_{(t)}} = K \end{cases}$$

Recordemos que seguimos en un escenario no trivial en que $x \neq 0$ y suponiendo que K es negativa (subproblema (a)). Analicemos ahora:

$$\frac{T''_{(t)}}{c^2 T_{(t)}} = K$$

Como seguimos en el subproblema en que K es negativo, decimos que:

$$\frac{T''_{(t)}}{c^2 T_{(t)}} = -\lambda^2$$

$$T''_{(t)} = -\lambda^2 c^2 T_{(t)}$$

$$T''_{(t)} + \lambda^2 c^2 T_{(t)} = 0$$

Cuyo polinomio característico es:

$$r^2 + c^2\lambda^2 = 0$$

$$r^2 = -c^2\lambda^2$$

$$r = \pm\sqrt{-c^2\lambda^2}$$

$$r = \pm\sqrt{-1c^2\lambda^2}$$

$$r = \pm c\lambda\sqrt{-1}$$

$$r = \pm c\lambda i$$

De nuevo dos raíces complejas conjugadas, sin parte real, por lo que:

$$e^{0t\pm c\lambda i}$$

Y análogamente a como hicimos antes con $X_{(x)}$:

$$T_{(t)} = K_3 \cos(c\lambda t) + K_4 \sin(c\lambda t)$$

Y como ya sabemos que $\lambda = \frac{n\pi}{L}$, podemos sustituir[57]:

[57] Recordemos: $n = 1,2,3,\ldots,+\infty$.

$$X_{(x)} = K_2 \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$T_{(t)} = K_3 \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right) + K_4 \sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)$$

Y ahora procedemos a montar la función que hemos instrumentado para resolver nuestra ecuación diferencial:

$$U_{(x,t)} = X_{(x)} \cdot T_{(t)}$$

$$X_{(x)} \cdot T_{(t)} = \left[K_2 \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right]\left[K_3 \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right) + K_4 \sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)\right]$$

$$X_{(x)} \cdot T_{(t)} = \left[\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right]\left[K_2K_3 \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right) + K_2K_4 \sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)\right]$$

$$X_{(x)} \cdot T_{(t)} = \left[\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right]\left[A_n \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right) + B_n \sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)\right]$$

Que son infinitas soluciones puesto que $n = \mathbb{N}$. Aún no aplicamos el principio de superposición[58]. Esperemos al resto de posibilidades de K.

§

Subproblema en que $K = 0$.

$$\begin{cases} \dfrac{X''_{(x)}}{X_{(x)}} = 0 \\ C.F. \rightarrow X_{(0)} = 0; X_{(L)} = 0 \\ \dfrac{T''_{(t)}}{c^2 T_{(t)}} = 0 \end{cases}$$

[58] Sumar todas las soluciones posibles.

Esto, al manipularlo, nos queda como:

$$\begin{cases} X''_{(x)} = 0 \\ C.F. \rightarrow X_{(0)} = 0; X_{(L)} = 0 \\ T''_{(t)} = 0 \end{cases}$$

Debido a la facilidad de esta situación, en vez de optar por construir los polinomios característicos, vamos a optar por la integración directa. Empecemos por $X''_{(x)} = 0$.

$$X''_{(x)} = 0$$

$$X'_{(x)} = K_1$$

$$X_{(x)} = K_1 x + K_2$$

Impongamos ahora las dos condiciones de frontera. La primera:

$$X_{(0)} = 0$$

$$X_{(0)} = K_1 0 + K_2 = 0 \rightarrow \therefore K_2 = 0$$

Luego sólo K_1 podría llegar a tener algún valor distinto de cero, ergo:

$$X_{(x)} = K_1 x$$

Ahora la segunda condición de frontera:

$$X_{(L)} = 0$$

Sustituimos en lo que ya hemos encontrado:

$$X_{(x)} = K_1 x \rightarrow X_{(L)} = K_1 L = 0$$

Y puesto que L es imposible que sea cero (es una distancia), necesariamente sólo es posible que:

$$K_1 = 0$$

Esto implica que para el subproblema en que $K = 0$, sólo obtenemos solución trivial pues:

$$U_{(x,t)} = X_{(x)} T_{(t)} \rightarrow U_{(x,t)} = 0 \cdot T_{(t)} \rightarrow U_{(x,t)} = 0$$

Que no nos aporta nada, por lo que no consumimos esfuerzo en analizar: $T''_{(t)} = 0$.

§

Vamos a terminar abordando el caso en que K es positiva. Para ello propongamos que: $K = \lambda^2$ y $\lambda > 0$. Siendo esto así, abordemos el último subproblema:

$$\begin{cases} \dfrac{X''_{(x)}}{X_{(x)}} = K \\ C.F. \rightarrow X_{(0)} = 0; X_{(L)} = 0 \\ \dfrac{T''_{(t)}}{c^2 T_{(t)}} = K \end{cases}$$

Usamos la misma estrategia que empleamos en el primer subproblema en que K-*negativa* y, así nos queda que:

$$\begin{cases} \dfrac{X''_{(x)}}{X_{(x)}} = \lambda^2 \\ C.F. \rightarrow X_{(0)} = 0; X_{(L)} = 0 \\ \dfrac{T''_{(t)}}{c^2 T_{(t)}} = \lambda^2 \end{cases}$$

Busquemos los polinomios característicos (que ya los tenemos del primer subproblema aunque con el signo de λ cambiado).

$$\begin{cases} \dfrac{X''_{(x)}}{X_{(x)}} = \lambda^2 \rightarrow X''_{(x)} - \lambda^2 X_{(x)} = 0 \\ C.F. \rightarrow X_{(0)} = 0; X_{(L)} = 0 \\ \dfrac{T''_{(t)}}{c^2 T_{(t)}} = \lambda^2 \rightarrow T''_{(t)} - c^2 \lambda^2 T_{(t)} = 0 \end{cases}$$

Para el caso de $X''_{(x)} - \lambda^2 X_{(x)} = 0$:

$$r^2 - \lambda^2 = 0$$
$$r^2 = \lambda^2$$
$$r = \pm\lambda$$

De ahí, necesariamente:

$$X_{(x)} = K_1 e^{\lambda x} + K_2 e^{-\lambda x}$$

Impongamos ahora la primera condición de frontera para tratar de despejar algo:

$$X_{(0)} = 0, \text{ en:}$$

$$X_{(x)} = K_1 e^{\lambda x} + K_2 e^{-\lambda x}$$

$$X_{(0)} = K_1 e^{\lambda 0} + K_2 e^{-\lambda 0} = 0$$

$$X_{(0)} = K_1 e^{0} + K_2 e^{0} = 0$$

$$X_{(0)} = K_1 \cdot 1 + K_2 \cdot 1 = 0$$

$$K_2 = -K_1$$

Sustituimos en lo que ya tenemos:

$$X_{(x)} = K_1 e^{\lambda x} + K_2 e^{-\lambda x}$$

$$X_{(x)} = K_1 e^{\lambda x} - K_1 e^{-\lambda x}$$

Impongamos ahora la segunda condición de frontera:

$$X_{(L)} = 0, \text{ en lo que ya sabemos de } X_{(x)}:$$

$$X_{(x)} = K_1 e^{\lambda x} - K_1 e^{-\lambda x}$$

$$X_{(L)} = K_1 e^{\lambda L} - K_1 e^{-\lambda L} = 0$$

$$X_{(L)} = K_1 \left(e^{\lambda L} - e^{-\lambda L}\right) = 0$$

Esto es cero cuando cualquiera de los dos factores es igual a cero:

a. $K_1 = 0$

   En cuyo caso:

$$X_{(x)} = K_1 e^{\lambda x} - K_1 e^{-\lambda x}$$

$$X_{(x)} = 0 e^{\lambda x} - 0 e^{-\lambda x}$$

$$X_{(x)} = 0e^{\lambda x} - 0e^{-\lambda x} = 0$$

Luego:

$$U_{(x,t)} = X_{(x)}T_{(t)}$$
$$U_{(x,t)} = 0 \cdot T_{(t)}$$
$$U_{(x,t)} = 0$$

Que es una solución trivial.

b. $e^{\lambda L} - e^{-\lambda L} = 0$

En cuyo caso:

$$e^{\lambda L} = e^{-\lambda L}$$
$$\lambda L = -\lambda L$$
$$2\lambda L = 0$$

Como L es imposible que sea cero y hemos impuesto que $\lambda > 0$. Esta solución no es válida.

Nos queda entonces, en este subproblema, una solución trivial por lo que nos ahorramos analizar la parte:

$$\frac{T''_{(t)}}{c^2 T_{(t)}}$$

§

Recapitulemos de nuevo. ¿Qué soluciones tenemos para el problema?

Constante K	*Soluciones*
$K = -\lambda^2$	$\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\left[A_n \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right) + B_n \sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)\right]$
$K = 0$	0
$K = \lambda^2$	0

Ahora se puede aplicar el principio de superposición y sumar todas las soluciones (en realidad solo hay una) para obtener una solución general[59] a nuestra ecuación de onda inicial:

$$\frac{\partial^2 U_{(x,t)}}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 U_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

$U_{(x,t)}$ es solución cuando:

$$U_{(x,t)} = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\left[A_n \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right) + B_n \sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)\right]$$

Nos falta por identificar A_n y B_n. Para ello miremos las condiciones iniciales. Recordemos que eran, para $x < 0 < L$:

$$U_{(x,0)} = f_{(x)} \qquad y \qquad \left.\frac{\partial U_{(x,t)}}{\partial t}\right|_{t=0} = g_{(x)}$$

Comencemos por la primera:

$$U_{(x,0)} = f_{(x)}$$

$$U_{(x,0)} = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\left[A_n \cos\left(\frac{cn\pi}{L}0\right) + B_n \sin\left(\frac{cn\pi}{L}0\right)\right] = f_{(x)}$$

[59] En este caso tenemos infinitas soluciones ya que $n = \mathbb{N}$. Entre ellas, por supuesto, está la solución trivial en $n = 0$.

$$U_{(x,0)} = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)[A_n \cos(0) + B_n \sin(0)] = f_{(x)}$$

$$U_{(x,0)} = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)[A_n \cdot 1 + B_n \cdot 0] = f_{(x)}$$

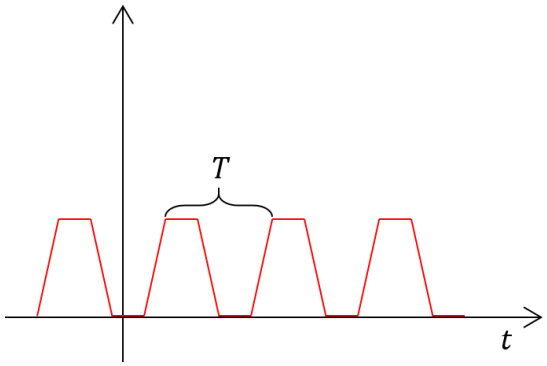
$$U_{(x,0)} = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = f_{(x)}$$

Es decir, estamos ante una suma infinita, en este caso: una serie de Fourier[60]:

$$f_{(x)} = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

[60] Es una Serie de Fourier. Recordémoslas un poco.

La idea subyacente en el concepto de Series de Fourier es poder imitar a una función de tipo T-periódico mediante una suma de funciones sinusoidales. Si con las series de Taylor buscábamos un polinomio que diera cuenta de funciones trascendentes, con las series de Fourier buscaremos expresar una función de tipo T-periódica mediante la suma de funciones sinusoidales.
¿Qué quiere decir esto exactamente? Es bastante simple. Imaginemos que tenemos una función $P_{(x)}$ que repite periódicamente un cierto patrón en un cierto periodo T, por ejemplo:



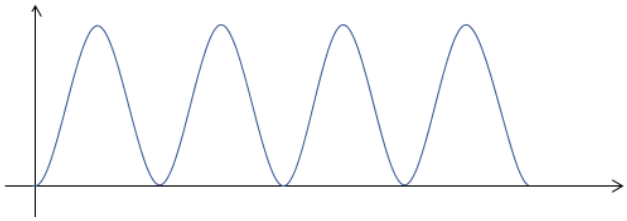
De una función como ésta podemos decir con toda seguridad que:

$$P_{(x+T)} = P_{(x)}$$

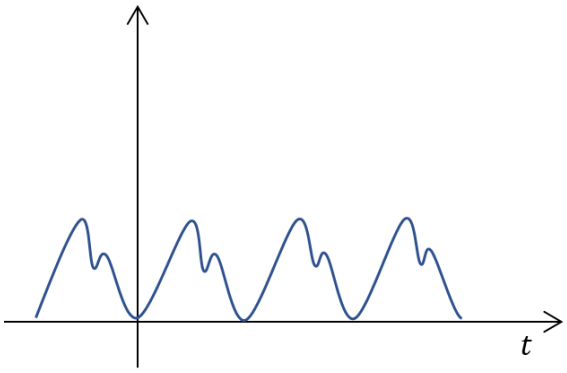
Es obvio que la función es igual a sí misma cada lapso T, donde T es el periodo y $1/T$ es la frecuencia.

Joseph Fourier demostró que mediante las sumas (series) de senos y cosenos, se podría construir una función equivalente a una función T-periódica como $P_{(x)}$. Veámoslo gráficamente:

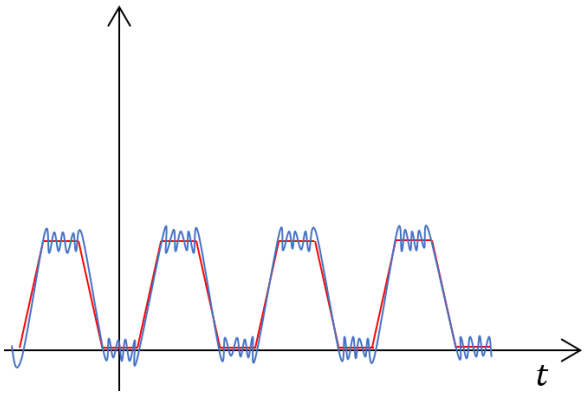
Si una función $f_{(x)} = \sin(\alpha)$ se representa aproximadamente así (en realidad así sería $\sin(\alpha) + 0{,}5$, pero bueno, nos hacemos a la idea) :



Y otra función $f_{(x)} = \sin(\alpha) + \sin(\beta)$ se puede representar aproximadamente así:



Entonces, Fourier demostró que existía el modo de encontrar una función basada en una serie de sumas de senos y cosenos que permitiera aproximarse (igualar en el infinito) a la función original $P_{(x)}$:



Para que esto sea posible basta con que $P_{(x)}$ muestre periodicidad, continuidad predecible (aunque sea a trazos, con espacios vacíos), esté acotada (por arriba y abajo) y tenga picos y valles finitos en un intervalo periódico determinado.
Hay varios modos de expresar las Series de Fourier:

$$f_{(x)} = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} \left[a_n \cos\left(2\pi n \frac{1}{T} x\right) + b_n \sin\left(2\pi n \frac{1}{T} x\right) \right]$$

O en su forma exponencial:

$$f_{(x)} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n \, e^{i 2\pi n \frac{1}{T} x}$$

Que es una suma infinita (no ponemos limite por arriba al integrando), es decir, una Serie… pero, convergente.

Recordemos que estos textos son auto explicativos, autocontenidos, por lo que no cejaremos hasta que todo concepto quede perfectamente claro. Veamos las Series de Fourier con un poco de más detalle, tenemos tiempo. Si alguien no quiere o no necesita tanto detalle, sencillamente, puede saltarse sin pérdida toda esta nota.

Desarrollemos un poco la forma trigonométrica en la que todo es constante excepto x y, claro, n, que es un parámetro cuya evolución conocemos. Sustituyamos para tratar de hallar aquello que aún no conocemos y que hemos marcado en rojo:

$$f_{(x)} = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty}\left[a_n \cos\left(2\pi n \frac{1}{T}x\right) + b_n \sin\left(2\pi n \frac{1}{T}x\right)\right]$$

$$n = 1$$
$$f_{(x)} = \frac{a_0}{2} + \left[a_n \cos\left(2\pi \frac{1}{T}x\right) + b_n \sin\left(2\pi \frac{1}{T}x\right)\right]$$

$$n = 2$$
$$f_{(x)} = \frac{a_0}{2} + \left[a_n \cos\left(2\pi 2\frac{1}{T}x\right) + b_n \sin\left(2\pi 2\frac{1}{T}x\right)\right]$$

$$n = 3$$
$$f_{(x)} = \frac{a_0}{2} + \left[a_n \cos\left(2\pi 3\frac{1}{T}x\right) + b_n \sin\left(2\pi 3\frac{1}{T}x\right)\right]$$

…

Es decir, como podíamos imaginar, siempre nos da lo mismo existiendo en el argumento de las funciones trigonométricas un múltiplo de $1/T$ (a razón de n).

a_n y b_n son, digamos, dos ponderadores; algo así como dos balanceadores que equilibrarán nuestra función en su lucha por parecerse todo lo posible a la función T-periódica original $P_{(x)}$. Por ejemplo, si la función original que queremos *imitar* trigonométricamente se parece mucho a un coseno, entonces a_n será muy grande y b_n muy pequeño (y viceversa para el seno).
Además, cuando queremos analizar el grado de parecido entre dos funciones recurrimos al producto interno que no es otra cosa que integrar el producto de las dos funciones que estamos comparando. Por ejemplo, si queremos saber cuánto se parece la función $P_{(x)}$ a la función $\cos\left(2\pi n \frac{1}{T}x\right)$ y así saber qué magnitud puede tener a_n (será mayor cuanto mayor sea el parecido), procedemos a medir el parecido del siguiente modo:

$$a_n = \int \cos\left(2\pi n \frac{1}{T}x\right) \cdot P_{(x)}\, dx$$

Pero, ¿en qué intervalo integramos? ¿De $-\infty$ a $+\infty$? ¡¿Para qué?!¡Esto es un coseno! ¡Nunca va a converger! En todo caso habría que integrar a lo largo de la unidad mínima de análisis: el patrón que repite, es decir, integrar en un rango múltiplo del periodo T como, por ejemplo $\left[-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}\right]$:

$$a_n = \frac{2}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \cos\left(2\pi n \frac{1}{T}x\right) \cdot P_{(x)}\, dx$$

E igualmente para el seno:

$$b_n = \frac{2}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \sin\left(2\pi n \frac{1}{T}x\right) \cdot P_{(x)}\, dx$$

De estas funciones, seno y coseno, sabemos que tienen un valor medio cero (obviamente, sabemos que las veces que están por encima del eje $y = 0$ son las mismas que las que están por debajo). Pero, ¿y si la función $P_{(x)}$ tiene un valor medio diferente de cero?, es decir, ¿y si $P_{(x)}$ está alejada del eje de abcisas? La respuesta es que para eso, precisamente, está $\frac{a_0}{2}$. Esto se podría conocer considerando a_n en $n = 0$:

$$a_0 = \frac{2}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \cos\left(2\pi 0 \frac{1}{T}x\right) \cdot P_{(x)}\, dx$$

$$a_0 = \frac{2}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \cos(0) \cdot P_{(x)}\, dx$$

$$a_0 = \frac{2}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} 1 \cdot P_{(x)}\, dx$$

$$a_0 = \frac{2}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} P_{(x)}\, dx$$

Así conocemos su valor medio de la función original $P_{(x)}$ en el intervalo estudiado.

Esto, como ya hemos dicho anteriormente, se puede expresar mediante una función exponencial con componente imaginaria: la Serie exponencial de Fourier.
La pieza de conexión es la identidad de Euler: $e^{i\pi} + 1 = 0$ y $e^{\pm i\alpha} = \cos(\alpha) \pm \sin(\alpha)$.

$$f_{(x)} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n\, e^{i2\pi n\frac{1}{T}x}$$

Como vemos, el sumatorio ahora, cosa que no sucedía en la forma trigonométrica, recorre desde $-\infty$ a $+\infty$. Esto nos va a permitir, al reordenar todos los elementos, agrupar los negativos y positivos para conformar exponenciales complejas que nos llevarán, de nuevo, a considerar senos y cosenos. Esto nos podrá servir para demostrar que el Coeficiente c_n, o Coeficiente de Fourier, es:

$$C_n = \frac{1}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} P_{(x)} e^{-i2\pi n\frac{1}{T}x} dx$$

Que, desarrollando la exponencial, nos quedará como:

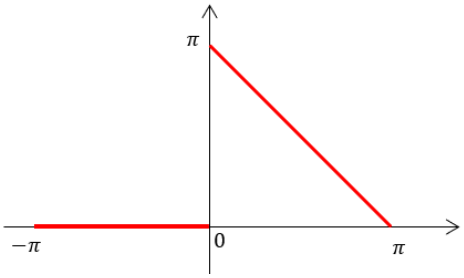
$$C_n = \frac{a_n - ib_n}{2}$$

Veamos un ejercicio para ver en directo el funcionamiento de las Series de Fourier.

Tenemos una función:

$$P_{(x)} = \begin{cases} 0 & para \quad -\pi < x < 0 \\ \pi - x & para \quad 0 \leq x \leq \pi \end{cases}$$

Esto, gráficamente es:



Vamos a estudiar una función en el rango $[-\pi, \pi]$ y el periodo de la función es $T = 2\pi$. También es interesante recordar las fórmulas que vamos a usar. La serie de Fourier en su forma trigonométrica:

$$f_{(x)} = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} \left[a_n \cos\left(2\pi n \frac{1}{T} x\right) + b_n \sin\left(2\pi n \frac{1}{T} x\right) \right]$$

Que, teniendo la *fortuna* (XD) de que $T = 2\pi$, nos queda como:

$$f_{(x)} = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} [a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)]$$

Que es la función de Fourier que estamos buscando para imitar a $P_{(x)}$.

Y las fórmulas para sus coeficientes:

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(nx) \cdot P_{(x)} \, dx$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin(nx) \cdot P_{(x)} \, dx$$

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} P_{(x)} \, dx$$

Empecemos por a_0.

$$a_0 = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} P_{(x)}\, dx$$

Como $P_{(x)}$ está en dos tramos, tendremos que sumar dos integrales en rangos diferentes:

$$a_0 = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{0} 0\, dx + \frac{1}{\pi}\int_{0}^{\pi} (\pi - x)\, dx$$

Lo marcado en rojo es cero y nos queda:

$$a_0 = \frac{1}{\pi}\int_{0}^{\pi} \pi\, dx - \frac{1}{\pi}\int_{0}^{\pi} x\, dx$$

$$\boldsymbol{a_0} = \frac{1}{\pi}\left[\pi x - \frac{x^2}{2}\right]_0^{\pi} = \left[\frac{1}{\pi}\left[\pi^2 - \frac{\pi^2}{2}\right]\right] - \left[\frac{1}{\pi}\left[\pi 0 - \frac{0^2}{2}\right]_0^{\pi}\right] = \boldsymbol{\frac{\pi}{2}}$$

Calculemos ahora a_n:

$$a_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \cos(nx)\cdot P_{(x)}\, dx$$

$P_{(x)}$ tiene dos tramos:

$$a_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{0} \cos(nx)\cdot 0\, dx + \frac{1}{\pi}\int_{0}^{\pi} \cos(nx)\cdot(\pi - x)\, dx$$

$$a_n = 0 + \frac{1}{\pi}\left(\int_{0}^{\pi} \cos(nx)\cdot(\pi - x)\, dx\right)$$

$$a_n = \frac{1}{\pi}\left(\int_{0}^{\pi} \pi\cos(nx) - x\cos(nx)\ dx\right)$$

$$a_n = \frac{1}{\pi}\left(\int_{0}^{\pi} \pi\cos(nx)\ dx - \int_{0}^{\pi} x\cos(nx)\ dx\right)$$

$$a_n = \left[\frac{1}{\pi}\left(\frac{\pi}{n}\sin(nx) - \left(\frac{1}{n^2}\cos(nx) + \frac{x}{n}\sin(nx)\right)\right)\right]_0^{\pi}$$

$$a_n = \left[\frac{1}{\pi}\left(\frac{\pi}{n}\sin(nx) - \frac{1}{n^2}\cos(nx) - \frac{x}{n}\sin(nx)\right)\right]_0^{\pi}$$

$$a_n = \frac{1}{\pi}\left(\frac{\pi}{n}\sin(n\pi) - \frac{1}{n^2}\cos(n\pi) - \frac{\pi}{n}\sin(n\pi)\right) - \frac{1}{\pi}\left(\frac{\pi}{n}\sin(n0) - \frac{1}{n^2}\cos(n0) - \frac{0}{n}\sin(n0)\right)$$

$$a_n = \frac{\pi}{\pi n}\sin(n\pi) - \frac{1}{\pi n^2}\cos(n\pi) - \frac{\pi}{\pi n}\sin(n\pi) - \frac{\pi}{\pi n}\sin(0) + \frac{1}{\pi n^2}\cos(0) + \frac{0}{\pi n}\sin(0)$$

El seno de π o de un múltiplo de π es cero también:

$$a_n = -\frac{1}{\pi n^2}\cos(n\pi) - \frac{\pi}{\pi n}\cdot 0 + \frac{1}{\pi n^2}\cdot 1 + \frac{0}{\pi n}\cdot 0$$

$$a_n = -\frac{1}{\pi n^2}\cos(n\pi) + \frac{1}{\pi n^2}$$

$$a_n = \frac{1}{\pi n^2}(-\cos(n\pi) + 1)$$

$$a_n = \frac{1-\cos(n\pi)}{\pi n^2}$$

Resulta obvio, si se piensa un poco que en ello, que :

$$\cos(n\pi) = -1^n$$

Luego:

$$\boldsymbol{a_n = \frac{1-(-1^n)}{\pi n^2}}$$

De manera que, por ejemplo, para $n = 5$:

$$a_5 = \frac{1-(-1^5)}{\pi 5^2} = \frac{1-(-1)}{25\pi} = \frac{2}{25\pi}$$

Calculemos ahora b_n:

$$b_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \sin(nx)\cdot P_{(x)}\,dx$$

$P_{(x)}$ tiene dos tramos:

$$b_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{0} \sin(nx)\cdot 0\,dx + \frac{1}{\pi}\int_{0}^{\pi} \sin(nx)\cdot(\pi - x)\,dx$$

$$b_n = \frac{1}{\pi}\left[\int_0^{\pi} \pi\sin(nx)\;dx - \int_0^{\pi} x\sin(nx)\;dx\right]$$

$$b_n = \frac{1}{\pi}\left[\int_0^{\pi} \pi\sin(nx)\;dx - \int_0^{\pi} x\sin(nx)\;dx\right]$$

$$b_n = \left[\frac{1}{\pi}\left(\frac{-\pi}{n}\cos(nx) - \left(\frac{1}{n^2}\sin(nx) - \frac{x}{n}\cos(nx)\right)\right)\right]_0^{\pi}$$

$$b_n = \frac{1}{\pi}\left(\frac{-\pi}{n}\cos(n\pi) - \left(\frac{1}{n^2}\sin(n\pi) - \frac{\pi}{n}\cos(n\pi)\right)\right) - \frac{1}{\pi}\left(\frac{-\pi}{n}\cos(n0) - \left(\frac{1}{n^2}\sin(n0) - \frac{0}{n}\cos(n0)\right)\right)$$

$$b_n = \frac{1}{\pi}\left(\frac{-\pi}{n}\cos(n\pi) - \left(0 - \frac{\pi}{n}\cos(n\pi)\right)\right) - \frac{1}{\pi}\left(\frac{-\pi}{n}1 - \left(0 - \frac{0}{n}0\right)\right)$$

$$b_n = \frac{1}{\pi}\left(\frac{-\pi}{n}\cos(n\pi) + \frac{\pi}{n}\cos(n\pi)\right) - \frac{1}{\pi}\left(\frac{-\pi}{n}\right)$$

$$\boldsymbol{b_n = \frac{1}{n}}$$

Es decir, tenemos ya:

$$\boldsymbol{a_0 = \frac{\pi}{2}; \quad a_n = \frac{1-(-1^n)}{\pi n^2}; \quad b_n = \frac{1}{n};}$$

Sustituyamos en:

$$f_{(x)} = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty}[a_n\cos(nx) + b_n\sin(nx)]$$

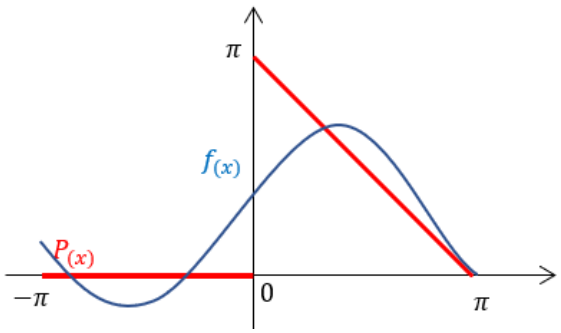
$$f_{(x)} = \frac{\pi}{4} + \sum_{n=1}^{+\infty}\left[\frac{1-(-1^n)}{\pi n^2}\cos(nx) + \frac{1}{n}\sin(nx)\right]$$

Veamos que nos sale para $n = 1$:

$$f_{(x)} = \frac{\pi}{4} + \frac{1-(-1^1)}{\pi 1^2}\cos(1x) + \frac{1}{1}\sin(1x)$$

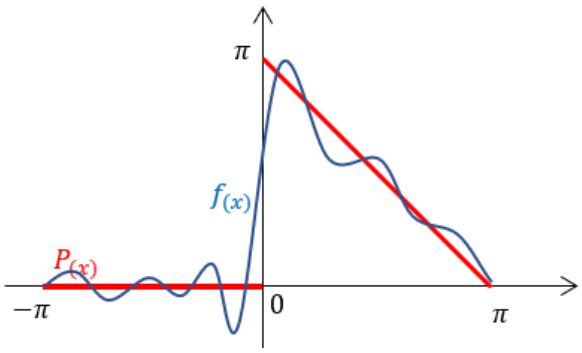
$$f_{(x)} = \frac{\pi}{4} + \frac{2}{\pi}\cos(x) + \sin(x)$$

Que gráficamente es algo así:



Observamos que hay cierto parecido entre $P_{(x)}$ y $f_{(x)}$.

Pero si llegamos a la octava suma, si acumulamos el sumatorio hasta que llegamos a $n = 8$, tenemos una gráfica de $f_{(x)}$ como ésta:



Que, efectivamente, se parece mucho más a $P_{(x)}$.

Más concretamente se trata de una Serie de Fourier de tipo seno exclusivamente, pues no contamos con la parte del coseno[61].

Por otro lado, sabemos que las series de Fourier están definidas para un intervalo de periodicidad $[-T, +T]$ (en nuestro caso al periodo lo hemos llamado L) y, en este caso, está definida sólo entre 0 y L (recordemos nuestra cuerda), es decir, sólo medio intervalo.

Conocemos cómo calcular estos coeficientes de las Series de Fourier[62]:

$$b_n = \frac{2}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \sin\left(2\pi n \frac{1}{T} x\right) \cdot f_{(x)}\, dx$$

Es decir, en nuestro caso:

$$A_n = \frac{2}{T}\int_{0}^{L} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \cdot U_{(x,0)}\, dx \quad , n = 1, 2, 3, \ldots$$

Utilicemos ahora la segunda de las condiciones iniciales:

$$\left.\frac{\partial U_{(x,t)}}{\partial t}\right|_{t=0} = g_{(x)}$$

En nuestra ecuación de onda:

[61] Podremos suponer que tanto a_o como b_n, (o como hayamos denominado a la constante arbitraria que acompaña a la parte del seno en su expresión general) son iguales a cero.

[62] Véase nota 60.

$$U_{(x,t)} = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\left[A_n \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right) + B_n \sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)\right]$$

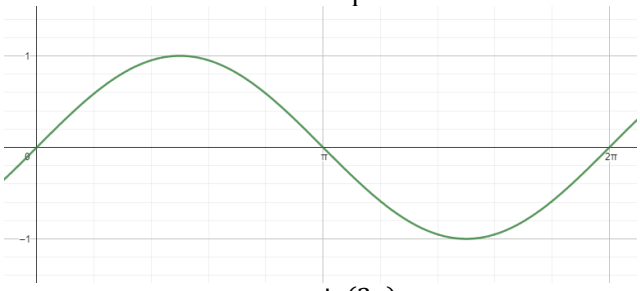
Es decir, tenemos que derivar parcialmente $U_{(x,t)}$ respecto a t e igualar t a cero. En este caso la derivada de la serie es lo mismo que la serie de las derivadas ya que la serie presenta convergencia uniforme[63], por lo que podremos hacer lo siguiente:

[63] Para comprender la Convergencia Uniforme frente a la Convergencia Puntual, consideremos este ejemplo.
Supongamos que tenemos una función seno que expresamos así:

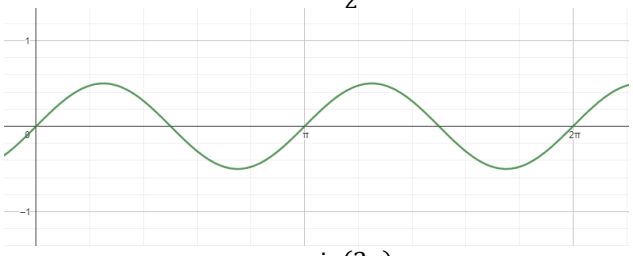
$$f_{n(x)} = \frac{\sin(nx)}{n}$$

Las sucesivas representaciones gráficas serían.

$$f_{1(x)} = \frac{\sin(1x)}{1}$$



$$f_{2(x)} = \frac{\sin(2x)}{2}$$

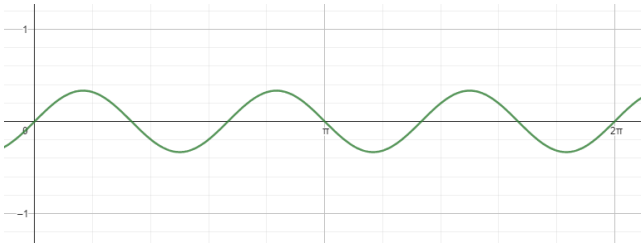


$$f_{3(x)} = \frac{\sin(3x)}{3}$$

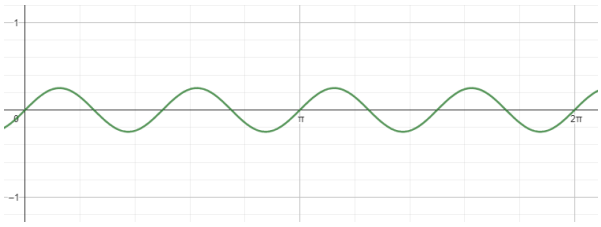
$$U_{(x,t)} = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\left[A_n \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right) + B_n \sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)\right]$$

$$\frac{\partial U_{(x,t)}}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)}{\partial t}\left[A_n \frac{\partial \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)}{\partial t} + B_n \frac{\partial \sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)}{\partial t}\right]$$

Pero el primer elemento no está en función de t por lo que queda constante frente al cambio de t:



$$f_{4(x)} = \frac{\sin(4x)}{4}$$



Vemos que el número de *picos* de la función entre 0 y π se corresponde con n y la altura que alcanza la función se corresponde con $1/n$ (en realidad $2/n$ si tomamos la parte de arriba y la de abajo del eje horizontal). Esto quiere decir que cuando $n \to \infty$ la función será indistinguible del eje horizontal. En todo momento ha estado *metida en un tubo* de altura $2/n$ que va menguando. Esto lo podemos enunciar así:

$$\lim_{n\to\infty} \sup\left|f_{n(x)} - f_{(x)}\right| = 0$$

Es decir, que la diferencia se hace indistinguible. La distancia máxima entra ambas, cuando $n \to \infty$ tiende a cero.

Esto es lo que decimos cuando dos funciones que convergen uniformemente: se produce una convergencia entre todos sus puntos.

En cambio, en la convergencia puntual de dos funciones, éstas, en cambio, no convergen en todos sus puntos.

$$\frac{\partial U_{(x,t)}}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\left[A_n \frac{\partial \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)}{\partial t} + B_n \frac{\partial \sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)}{\partial t}\right]$$

Ahora derivamos:

$$\frac{\partial U_{(x,t)}}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\left[-A_n \frac{cn\pi}{L}\sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right) + B_n \frac{cn\pi}{L}\cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)\right]$$

Una vez derivado podemos identificar nuestra expresión con la segunda condición inicial, ¿qué sucede cuando $t = 0$?

$$\frac{\partial U_{(x,t)}}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\left[-A_n \frac{cn\pi}{L}\sin\left(\frac{cn\pi}{L}0\right) + B_n \frac{cn\pi}{L}\cos\left(\frac{cn\pi}{L}0\right)\right]$$

$$\frac{\partial U_{(x,t)}}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\left[-A_n \frac{cn\pi}{L}\cdot 0 + B_n \frac{cn\pi}{L}\cdot 1\right]$$

$$\frac{\partial U_{(x,t)}}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \frac{cn\pi}{L}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = g_{(x)}$$

Que de nuevo es una serie de Fourier de tipo seno cuyo coeficiente podemos conocer mediante:

$$b_n = \frac{2}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \sin\left(2\pi n\frac{1}{T}x\right)\cdot g_{(x)}\, dx$$

Es decir, según esto, podemos decir que de aquí:

$$\frac{\partial U_{(x,t)}}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \frac{cn\pi}{L} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = g_{(x)}$$

Podemos despejar B_n así:

$$B_n \frac{cn\pi}{L} = \frac{2}{L}\int_0^L \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \cdot g_{(x)}\, dx \quad , n = 1,2,3,\ldots$$

$$B_n = \frac{2}{cn\pi}\int_0^L \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \cdot g_{(x)}\, dx \quad , n = 1,2,3,\ldots$$

De manera que ya ha llegado el momento en que tenemos ya despejadas todas las incógnitas a encontrar para resolver la ecuación diferencial del comportamiento ondulatorio a la que hemos dedicado este capítulo:

$$\frac{\partial^2 U_{(x,t)}}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 U_{(x,t)}}{\partial x^2}$$

Una ecuación en la que teníamos que hallar una función de onda $U_{(x,t)}$ tal que satisficiera la igualdad y que no es otra que:

$$U_{(x,t)} = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\left[A_n \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right) + B_n \sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)\right]$$

Siendo que:

$$A_n = \frac{2}{T}\int_0^L \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \cdot U_{(x,0)}\, dx \quad , n = 1,2,3,\ldots$$

$$B_n = \frac{2}{cn\pi}\int_0^L \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\cdot g_{(x)}\,dx \quad ,n = 1,2,3,\ldots$$

Así habríamos resuelto la ecuación diferencial propuesta.

Veamos ahora cómo podríamos aplicar todo esto la Ecuación de Schrödinger en su versión unidimensional (x) y dependiente del tiempo[64]. Veamos hacia dónde nos llevan el tipo de soluciones propuestas.

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{(x,t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + E_P\psi_{(x,t)}$$

Procedamos, siempre que sea posible, a separar las variables[65]:

$$\psi_{(x,t)} = X_{(x)}\cdot T_{(t)}$$

Sustituimos:

$$i\hbar\frac{\partial X_{(x)}\cdot T_{(t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 X_{(x)}\cdot T_{(t)}}{\partial x^2} + E_P X_{(x)}\cdot T_{(t)}$$

$$i\hbar X_{(x)}\frac{\partial T_{(t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}T_{(t)}\frac{\partial^2 X_{(x)}}{\partial x^2} + E_P X_{(x)}T_{(t)}$$

[64] Ya anticipamos algo en la nota XXX (parte 1).

[65] Esto es clave en este epígrafe ya que si podemos separar variables así, obtendremos soluciones estacionarias. Ahora lo veremos.

Dividimos por $X_{(x)}T_{(t)}$ en todos los términos y nos queda:

$$i\hbar\frac{1}{T_{(t)}}\frac{\partial T_{(t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X_{(x)}}\frac{\partial^2 X_{(x)}}{\partial x^2} + E_P$$

Y ya hemos visto que esto implica necesariamente que[66]:

$$i\hbar\frac{1}{T_{(t)}}\frac{dT_{(t)}}{dt} = K \rightarrow \frac{dT_{(t)}}{dt} = \frac{KT_{(t)}}{i\hbar} \rightarrow \frac{dT_{(t)}}{dt} = \frac{-iKT_{(t)}}{\hbar}$$

$$\boldsymbol{T_{(t)} = Ae^{\frac{-iK}{\hbar}t}}$$

Que es independiente del espacio.

Y, en la parte espacial (que, claro, nos deberá quedar como la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X_{(x)}}\frac{d^2 X_{(x)}}{dx^2} + E_P = K$$

Despejamos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X_{(x)}}{X_{(x)}}\frac{d^2 X_{(x)}}{dx^2} + E_P X_{(x)} = X_{(x)}K$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 X_{(x)}}{dx^2} + E_P X_{(x)} = X_{(x)}K$$

[66] Recordemos que A es la constante de normalización. Vemos, entonces, que $T_{(t)}$ es una función compleja que podemos imaginar como un vector rotando en el eje complejo de coordenadas según evoluciona el tiempo.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X_{(x)}}\frac{d^2X_{(x)}}{dx^2}+E_P=K$$

Que es independiente del tiempo y que podemos expresar empleando el Operador Hamiltoniano, que sabemos que tiene la forma:

$$\widehat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 ALGO}{\partial x^2}+E_{P(x)}ALGO$$

Luego podemos expresar la parte espacial como:

$$KX_{(x)}=\widehat{H}X_{(x)}$$

Veamos qué tipo de soluciones se derivan de esta situación. En realidad, es interesante anticiparse un poco. Con esto que decimos lo que estamos tratando de exponer es que siempre que podamos hacer una separación de variables al modo en que hemos hecho, obtendremos soluciones de estados estacionarios para determinadas magnitudes. La disposición, en dos *fragmentos independientes*, nos va a producir efectos interesantes. Es posible que al realizar la separación de variables tal y como hemos hecho, hemos conseguido simplificar mucho la resolución del problema pero, como efecto colateral, quizás hayamos restringido un poco las soluciones posibles para la ecuación pero, también, vamos a conseguir otros efectos interesantes: vamos a conseguir soluciones para Estados Estacionarios desde los que, finalmente, podremos obtener prácticamente toda la información que necesitemos sobre el sistema. ¿Por qué sucede esto?

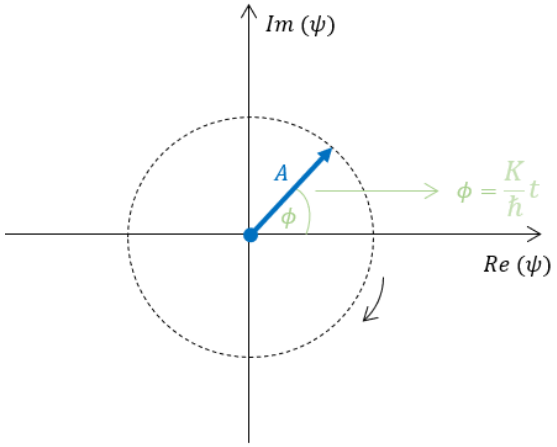
Recordemos que, desde la Ecuación de Schrödinger *dependiente*[67] del tiempo, hemos llegado a:

$$T_{(t)} = Ae^{\frac{-iK}{\hbar}t}$$

$$KX_{(x)} = \widehat{H}X_{(x)}$$

Ecuaciones, respectivamente, independientes del espacio y del tiempo y donde K es la constante surgida del proceso de separación de variables.

Si nos fijamos en la parte temporal, observamos que $T_{(t)}$ es, en principio, un número complejo y, tal y como está expresado, implica que tiene una magnitud constante ya que la evolución del tiempo no afecta en nada al valor absoluto de $T_{(t)}$. Esto es fácil visualizarlo de la siguiente manera: $T_{(t)}$ es un vector de magnitud constante que rota en el espacio complejo con la evolución del tiempo. El radio es de magnitud invariante ante la evolución del tiempo.



Es decir, en Mecánica cuántica, la evolución del tiempo, habitualmente, no complica en exceso las cosas. ¿Quiere esto decir que no es necesario o no se puede estudiar el cambio del tiempo? Por supuesto que se puede, pero se hará desde la superposición de estados

[67] A pesar de partir de la Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, llegamos a soluciones estacionarias, independientes del tiempo.

estacionarios. En breve, más adelante, veremos de qué estamos hablando. De momento sigamos analizando el tipo de escenario con $T_{(t)}$ de magnitud invariante ante el cambio del tiempo. Para ello sustituyamos la parte temporal $\left(e^{\frac{-iK}{\hbar}t}\right)$ en $\psi_{(x,t)}$ (de momento no aparecerá A porque podríamos normalizar más adelante aunque para los efectos de lo que queremos probar aquí no es necesario) y observemos los efectos. Tenemos que:

$$\psi_{(x,t)} = X_{(x)} \cdot e^{\frac{-iK}{\hbar}t}$$

Y ahora busquemos qué tipo de soluciones, para diferentes magnitudes, nos arroja este escenario. Por ejemplo, recordemos que hemos definido la densidad de distribución de la probabilidad de colapso de la función de onda como:

$$\rho_{(x,t)} = \left|\psi_{(x,t)}\right|^2$$
$$\rho_{(x,t)} = \psi^*_{(x,t)} \cdot \psi_{(x,t)}$$

Sustituyendo llegamos a[68]:

$$\rho_{(x,t)} = X^*_{(x)} e^{\frac{iK}{\hbar}t} X_{(x)} e^{\frac{-iK}{\hbar}t}$$

[68] Obsérvese que en la parte conjugada hemos de cambiar el signo al imaginario. Totalmente lógico pues si:

$$e^{i\alpha} = \cos(\alpha) + i\sin(\alpha)$$

Su conjugado es:

$$e^{-i\alpha} = \cos(\alpha) - i\sin(\alpha)$$

$$\rho_{(x,t)} = X^*_{(x)} X_{(x)} e^{\frac{iK}{\hbar}t - \frac{iK}{\hbar}t}$$

$$\rho_{(x,t)} = X^*_{(x)} X_{(x)} e^{0}$$

$$\rho_{(x,t)} = X^*_{(x)} X_{(x)} \cdot 1$$

$$\rho_{(x,t)} = X^*_{(x)} X_{(x)}$$

Es decir, que no hay dependencia del tiempo. Realizando la separación de variables para la función de onda, obtenemos soluciones sobre la probabilidad que no dependen del tiempo, es decir, como hemos dicho, obtenemos una solución de estado estacionario.

Veamos más ejemplos. Miremos, por ejemplo, los valores promedio que se obtienen. Para ello imaginemos que queremos conocer el valor medio de un operador cualquiera, por ejemplo, $\hat{Q}$ que opera sobre la función de onda ψ y que no afecta al tiempo. El operador $\hat{Q}$ no incluye ninguna $\frac{\partial}{\partial t}$ dentro. De hecho, la mayoría de los operadores que vamos a usar no tienen relación con la evolución del tiempo: $\hat{x} = x$; $\hat{p} = \frac{\partial}{\partial x}$; $\hat{E}_{CIN} = \frac{\partial^2}{\partial X^2}$; ...
Sabemos que el valor esperado $\langle \hat{Q} \rangle$ del modo en que el operador $\hat{Q}$ afecta a la función de onda ψ lo podemos calcular como:

$$\langle \hat{Q} \rangle = \int \psi^*_{(x,t)} \cdot \hat{Q} \cdot \psi_{(x,t)} \, dx$$

$$\langle \hat{Q} \rangle = \int X^*_{(x)} e^{i\frac{Kt}{\hbar}} \cdot \hat{Q} \cdot X_{(x)} e^{-i\frac{Kt}{\hbar}} dx$$

Como hemos dicho que el operador $\hat{Q}$ no actúa sobre el tiempo, es decir, no contiene derivadas en función del tiempo en su interior, podemos reescribir como:

$$\langle \hat{Q} \rangle = \int X^*_{(x)} e^{i\frac{Kt}{\hbar}} \cdot e^{-i\frac{Kt}{\hbar}} \cdot \hat{Q} \cdot X_{(x)}\, dx$$

Que, con lo ya hemos visto, nos queda como:

$$\langle \hat{Q} \rangle = \int X^*_{(x)} \cdot \hat{Q} \cdot X_{(x)}\, dx$$

Es decir, que $\langle \hat{Q} \rangle$, como hemos establecido como premisa, no tiene dependencia del tiempo (aunque parece un razonamiento circular, la finalidad de esta exposición es demostrar que siempre tendemos a soluciones estacionarias en casos en los que ψ se multiplique por su conjugado imaginario).

Veamos otro ejemplo, aunque ligeramente diferente y con fines también ligeramente diferentes. Vamos a dejar, por el momento, la Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y analicemos un tipo de solución que obtenemos para la energía. Ya que estamos hablando de resultados independientes del tiempo, no podemos resistirnos a traer este asunto aquí y ahora. Veamos el tipo de solución que obtenemos para le energía. Para ello tomemos esta exposición de la Ecuación de Schrödinger, esta vez sí, como hemos dicho, independiente del tiempo (pues sólo tomamos la parte exclusivamente espacial):

$$\hat{H}E = EX_{(x)}$$

Calculemos el valor esperado del Operador Hamiltoniano: $\langle \widehat{H} \rangle$. Como es puramente espacial, podemos hacer lo siguiente:

$$\langle \widehat{H} \rangle = \int X^*_{(x)} \widehat{H} X_{(x)} \, dx$$

Pero, resulta que podemos sustituir:

$$\langle \widehat{H} \rangle = \int X^*_{(x)} E X_{(x)} \, dx$$

Como E, la energía, es constante, podemos sacarla del integrando:

$$\langle \widehat{H} \rangle = E \int X^*_{(x)} X_{(x)} \, dx$$

Y como nuestra función de onda debe estar normalizada y:

$$\int X^*_{(x)} X_{(x)} \, dx = 1$$

Podemos decir que:

$$\langle \widehat{H} \rangle = E$$

Es, además, importante señalar, que este resultado no sólo es independiente del tiempo, cosa que es de lo que estamos hablando en este epígrafe sino que, además, y casi más importante, es una medida

concreta, no aproximada, de un estado cuántico. No hay incertidumbre en ella sino que es exactamente E y, además, siempre mediremos lo mismo con independencia de la evolución del tiempo. Ya volveremos sobre esto más adelante pero, de momento, analicemos en primera instancia y con un mínimo de detalle este resultado. Recordemos que definimos el Principio de incertidumbre para la energía como:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

¿Cómo compatibilizamos esta expresión con lo que acabamos de decir?

Si la incertidumbre de la energía es cero, es decir, si $\Delta E = 0$, ¿qué se supone, que para tratar de equilibrar la desigualdad $\Delta t = \infty$?

Pues sí, justamente, eso, Δt tiene que ser infinito.

¿Y qué se supone que significa esto en términos físicos?

Pues que esta realidad existe siempre de la misma manera, sin depender del tiempo. Es así *siempre*. Desde el Big Bang hasta un posible Big Crunch. Y ésta es una hermosa afirmación a la que hemos llegado en último término desde la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (esta última vez sí, la ecuación no-time dependent): $\widehat{H}E = EX_{(x)}$.

Conocer datos del sistema estacionario nos aporta información para acceder al resto de secretos de la naturaleza de los estados cuánticos y de *ella* misma.

¿Cuándo?... Desde siempre y para siempre.

Creemos que ha llegado el momento de cerrar este capítulo.

Vale.

Superposición de estados estacionarios.

Ya sabemos que los estados estacionarios son independientes de la evolución del tiempo y que podemos obtener preciosa información de ellos. Sin embargo el reto sigue estando en conocer, también, el cambio de las magnitudes cuánticas bajo estudio según progresa del tiempo. Aquí entra en juego el fenómeno de la superposición de estados estacionarios.

Esta realidad experimental de superposición la podemos modelizar basándonos en un hecho fundamental de la Ecuación de Schrödinger: su linealidad. Analicemos su versión dependiente del tiempo.

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{(x,t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{(x,t)}}{\partial x^2} + E_P \psi_{(x,t)}$$

Su linealidad consiste en que existiendo dos funciones tales que $\gamma_{(x,t)}$ resuelve la Ecuación de Schrödinger y otra función, por ejemplo, $\phi_{(x,t)}$ también la resuelve, entonces $\psi_{(x,t)} = \gamma_{(x,t)} + \phi_{(x,t)}$, también es solución para la ecuación. Es decir, algo así como que si a la solución le sumamos un *fragmento de la misma naturaleza*, el conjunto de

ambas soluciones sigue siendo solución porque la relación entre los términos de la ecuación es lineal.

Veámoslo escrito:

$$i\hbar\frac{\partial\left(\gamma_{(x,t)}+\phi_{(x,t)}\right)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\left(\gamma_{(x,t)}+\phi_{(x,t)}\right)}{\partial x^2}+E_P\left(\gamma_{(x,t)}+\phi_{(x,t)}\right)$$

Esto podemos reescribirlo como

$$i\hbar\left(\frac{\partial\gamma_{(x,t)}}{\partial t}+\frac{\partial\phi_{(x,t)}}{\partial t}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\gamma_{(x,t)}}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\phi_{(x,t)}}{\partial x^2}\right)+E_P\gamma_{(x,t)}+E_P\phi_{(x,t)}$$

Esto quiere decir que, con carácter general ψ puede ser solución siendo suma de funciones que son solución[69]:

$$\psi_{(x,t)}=\sum_j C_j X_{(x)}\, e^{-i\frac{K_j t}{\hbar}}$$

Donde C_j es una constante que indica algo así como cuánto pesa cada una de las soluciones en la solución total $\psi_{(x,t)}$.

En definitiva, $\psi_{(x,t)}$ puede contener toda una batería de diferentes soluciones de estados estacionarios para la Ecuación de Schrödinger y, aún más importante, la suma final contenida en $\psi_{(x,t)}$ es una solución completamente general, es decir, que es solución a todos los estados posibles: estacionarios y no estacionarios ya que, en Mecánica

[69] Cada una de esas funciones es separable en parte espacial y parte temporal.

Cuántica, cualquier estado puede ser expresado como una superposición de estados estacionarios. Es decir, si bien la metodología de resolución de ecuaciones diferenciales (separación de variables, etc…) que estamos empleando hasta ahora, no arroja el total de tipos de soluciones matemáticas con carácter general para todo tipo de problemas físicos, en el caso de la Mecánica Cuántica y la Ecuación de Schrödinger sí que no sirve para acceder a la solución de todos sus estados posibles. Algún día la corriente iría a favor...

¿Por qué es esto así así en el caso de la Ecuación de Schrödinger? Porque al separar las variables en ésta, la parte espacial se convierte en una instancia del problema de Stürm-Liouville[70], es decir, un caso

[70] ¿Qué es esto? Desde Newton en adelante, pasando por Laplace, Fourier y los mismos Stürm y Liouville, la gente se puso como loca a resolver diferentes tipologías de Ecuaciones Diferenciales. Es cierto que en muchos casos son todo un reto y encontrar algoritmos de solución general es un entretenimiento fantástico. Eso pasó con un determinado tipo de ecuación diferencial, a saber, aquellas Ecuaciones Diferenciales Ordinarias de segundo orden y homogéneas, para las que Stürm y Liouville encontraron un algoritmo para encontrar un conjunto de soluciones.

Imaginemos que nos piden encontrar una base ortonormal de funciones propias del problema de Stürm-Liouville de la siguiente ecuación diferencial:

$$y'' + \lambda y = 0$$

De esta ecuación podemos decir que es:

- Una Ecuación Diferencial Ordinaria de segundo orden y homogénea.
- Al ser lineal (la variable independiente y, ni se encuentra elevada a algo que no sea uno ni está multiplicada por otra función) y homogénea (pues está igualada a cero), su conjunto de soluciones conforma un espacio vectorial de dimensión igual al orden de la EDO, es decir, 2. Veamos esa base de dos dimensiones, por supuesto, linealmente independientes:

$$y_\lambda = c_1 y_1 + c_2 y_2$$

- El parámetro λ implica que para cada cambio de el mismo hay una nueva ED y, por lo tanto, una nueva solución diferente.

Además nos establecen las siguientes condiciones de contorno (*fronteras*):

$$y_{(0)} = y_{(L)} = 0$$

Resolver el problema es encontrar las soluciones en ese intervalo $[0, L]$ para los diferentes valores de λ.

Recordemos antes una cuestión. Cuando tenemos una ecuación diferencial ordinal, lineal, homogénea como ésta:

$$ay'' + by'' + cy = 0$$

Podemos usar su ecuación característica o auxiliar:

$$ar^2 + br + c = 0 \rightarrow r = \frac{-b \mp \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

Esto nos puede dar:

a. $b^2 - 4ac > 0$, dos soluciones reales. En este caso las soluciones a la ecuación diferencial, viniendo de la solución de la ecuación auxiliar r_1 y r_2, serán:

$$y_{(x)} = c_1 e^{r_1 x} + c_2 e^{r_2 x}$$

b. $b^2 - 4ac = 0$, una solución real (dos iguales repetidas). En este caso serán:

$$y_{(x)} = c_1 e^{r_1 x} + c_2 x e^{r_1 x}$$

c. $b^2 - 4ac < 0$, dos soluciones complejas conjugadas. En este caso las soluciones a la ecuación diferencial, viniendo de la solución de la ecuación auxiliar $r_1 = \alpha + i\beta$ y $r_2 = \alpha - i\beta$, donde $\alpha\ y\ \beta > 0$, será:

$$y_{(x)} = c_1 e^{\alpha x} \cos \beta x + c_2 e^{\alpha x} \sin \beta x$$

Así, volviendo a nuestra EDO:

$$y'' + \lambda y = 0$$

Deducimos su ecuación característica:

$$r^2 + \lambda = 0 \rightarrow r = \pm\sqrt{-\lambda}$$

Y, dependiendo del valor de λ, podemos obtener los tres escenarios anteriores. Veámoslos.

Subproblema a: $\lambda > 0$

En este caso tendremos soluciones complejas ya que:

$$r = \pm\sqrt{-(\lambda)}$$

Es decir:

$$r = \pm i\sqrt{\lambda}$$

Que son dos números complejos conjugados con parte real igual a cero:

$$r_1 = 0 + i\sqrt{\lambda}$$

$$r_2 = 0 - i\sqrt{\lambda}$$

Sabemos que este escenario tiene este tipo de solución:

$$y_{(x)} = c_1 e^{\alpha x}\cos(\beta x) + c_2 e^{\alpha x}\sin(\beta x)$$
$$y_{(x)} = c_1 e^{0x}\cos(\sqrt{\lambda}x) + c_2 e^{0x}\sin(\sqrt{\lambda}x)$$
$$y_{(x)} = c_1\cos(\sqrt{\lambda}x) + c_2\sin(\sqrt{\lambda}x)$$

Ahora, empleamos la primera condición de frontera:

$$y_{(0)} = c_1\cos(\sqrt{\lambda}0) + c_2\sin(\sqrt{\lambda}0) = 0$$
$$y_{(0)} = c_1\cdot 1 + c_2\cdot 0 = 0$$

Necesariamente:

$$c_1 = 0$$

Y, sustituyendo la segunda condición de frontera en lo que ya tenemos:

$$y_{(0)} = c_2\sin(\sqrt{\lambda}L) = 0$$

Esto es verdad sólo si:

$$\sin(\sqrt{\lambda}L) = 0$$

Que sólo ocurre para:

$$\sqrt{\lambda}L = \pi n \quad \forall n \geq 0$$

Es decir para:

$$\lambda_n = \left(\frac{\pi n}{L}\right)^2 \quad \forall n \geq 0$$

Luego la solución es:

$$y_{(x)} = c_2\sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right) \ , \forall\lambda_n = \left(\frac{\pi n}{L}\right)^2 \quad \forall n \geq 0$$

§

Subproblema b: $\lambda = 0$

Si λ es igual a cero, entonces r será también igual a cero:

$$r = \pm\sqrt{0}$$

Luego la solución será:

$$y_{(x)} = c_1 e^{r_1 x} + c_2 x e^{r_1 x}$$

$$y_{(x)} = c_1 + c_2 x$$

Y aportando ahora las condiciones de contorno:

$$y_{(0)} = 0$$

Colegimos que:

$$y_{(x)} = c_1 + c_2 x$$

$$y_{(0)} = c_1 + c_2 0 = 0 \rightarrow c_1 = 0$$

Y, segunda condición de contorno:

$$y_{(L)} = 0$$

$$y_{(x)} = c_1 + c_2 x$$

$$y_{(L)} = 0 + c_2 L = 0$$

Como L es una longitud y no puede ser igual a cero, necesariamente:

$$c_2 = 0$$

Por lo tanto, $y = 0$ para $\lambda = 0$.

§

Subproblema c: $\lambda < 0$

Si λ es negativo, entonces, en la raíz de nuestra ecuación auxiliar tenemos que el discriminante es positivo.

$$r = \pm\sqrt{-(-\lambda)}$$

Para este tipo de casos, (a), hemos dicho que la solución es del tipo:

$$y_{(x)} = c_1 e^{r_1 x} + c_2 e^{r_2 x}$$

Tomamos la primera de las condiciones de contorno:

$$y_{(0)} = 0$$

$$y_{(0)} = c_1 e^{r_1 0} + c_2 e^{r_2 0} = c_1 + c_2 = 0$$

$$c_2 = -c_1$$

Tomemos ahora la segunda condición de frontera y sustituyamos en lo que ya tenemos:

$$y_{(L)} = c_1 e^{r_1 L} - c_1 e^{r_2 L} = 0$$

Ponemos las dos soluciones del polinomio característico:

$$y_{(L)} = c_1 e^{\sqrt{-\lambda} L} - c_1 e^{-\sqrt{-\lambda} L}$$

Sacamos factor común:

$$y_{(L)} = c_1 e^{\sqrt{-\lambda} L} \left(1 - c_1 e^{-2\sqrt{-\lambda} L}\right) = 0$$

Y esta igualdad, puesto que necesariamente $L \neq 0$, sólo se cumple si $c_1 = 0$, lo que implica que en este subsistema $c_2 = 0$, pues son iguales pero con distinto signo.

§

Luego la única solución no trivial, diferente de cero, que encontramos es:

$$y_{(x)} = c_2 \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right) \ , \forall \lambda_n = \left(\frac{\pi n}{L}\right)^2 \quad \forall n \geq 0$$

Ahora notemos que $\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3$ ... Es contable, ordenable, y crece indefinidamente, luego podemos decir que:

$$\lim_{n\to\infty} \lambda_n = \infty$$

Ahora un pequeño Deus ex Machina. Sabemos que:

$$\int_0^L \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right) \sin\left(\frac{\pi m}{L}x\right) dx = 0, n \neq m$$

Donde $y_n = \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right)$ e $y_m = \sin\left(\frac{\pi m}{L}x\right)$, son soluciones diferentes para diferentes λ_n. Esta integral es el producto interno de dos funciones dentro de un mismo espacio vectorial. Con dicho producto podemos conocer algunas propiedades del espacio:

- Si el producto interno de dos funciones es igual a cero, como el caso que hemos puesto, ambas funciones son linealmente independientes y, en este caso, además, son ortogonales. Es decir, el conjunto de todas estas soluciones conforma un conjunto de elementos ortogonales. Y esto es justamente lo que nos pedía el problema tipo Stürm-Liouville.

§

Hasta aquí hemos visto un caso genérico resolviendo una ecuación diferencial. Vamos a ver, ahora sí, el problema enfocado desde la perspectiva Stürm-Liouville que, ciertamente, es la resolución de un tipo muy específico de ecuación diferencial lineal, homogénea de segundo orden (hay una derivada de una derivada y') como la siguiente (presentamos su forma Auto Adjunta):

$$\frac{d}{dx}\left[r_{(x)}y'\right] + \left(q_{(x)} + \lambda p_{(x)}\right)y = 0$$

Con las siguientes condiciones de frontera:

$$\begin{cases} A_1 y_{(a)} + B_1 y'_{(a)} = 0 \\ A_2 y_{(b)} + B_2 y'_{(b)} = 0 \end{cases}$$

Donde A_1 y B_1 no pueden ser iguales a cero al mismo tiempo (y lo mismo sucede con A_2 y B_2).

Esto es un problema regular de Stürm-Liouville.

En el caso de la ecuación diferencial que hemos resuelto antes podríamos equipararlo atendiendo a este paralelismo:

$$\frac{d}{dx}\left[r_{(x)}y'\right] + \left(q_{(x)} + \lambda p_{(x)}\right)y = 0$$

VS.

$$y'' + \lambda y = 0$$

$$y_{(0)} = y_{(L)} = 0$$

$$r_{(x)} = 1;\ q_{(x)} = 0;\ p_{(x)} = 1;\ A_1 = 1;\ B_1 = 0; A_2 = 1;\ B_2 = 0$$

En un intervalo $[0, L]$

Así, el Teorema que nos aporta las propiedades del Problema de Stürm-Liouville, es:

- El Problema de Stürm-Liouville tiene solución para una infinidad de parámetros $\lambda_n \in \mathbb{R}$, a los que se denominan autovalores o valores propios (*eigenvalues*) de manera que:

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 \dots < \lambda_n \dots \to \lim_{n\to\infty} \lambda_n = \infty$$

- Para cada autovalor λ_n existe una solución y_n del PSL a la que se nomina auto función.
- Dos auto funciones asociadas a autovalores distintos son linealmente independientes.
- El conjunto de auto funciones $\{y_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ forman un conjunto ortogonal con el producto interior (vamos, el *producto escalar* entre funciones):

$$\langle y_n | y_m \rangle = \int_a^b p_{(x)} y_n y_m \, dx$$

En determinados casos, también podemos abordar el Problema Stürm-Liouville desde su forma Auto Adjunta. Esto facilita un poco las cosas, pero antes hay que transformarla, claro. La forma Auto adjunta ya la conocemos:

$$\frac{d}{dx}\left[r_{(x)} y'\right] + \left(q_{(x)} + \lambda p_{(x)}\right) y = 0$$

Pero, si estamos ante una ecuación con forma regular:

$$a_{(x)} y'' + b_{(x)} y' + \left(c_{(x)} + \lambda d_{(x)}\right) y = 0$$

Debemos *conminarla amablemente* a que se presente bajo su Forma Auto Adjunta del PSL. Para ello, basta seguir estos pasos:

$$y'' + \frac{b_{(x)}}{a_{(x)}} y' + \left(\frac{c_{(x)}}{a_{(x)}} + \lambda \frac{d_{(x)}}{a_{(x)}}\right) y = 0$$

Y multiplicar todo por el factor (esto viene de soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias, poca cosa):

$$\mu_{(x)} = e^{\int \frac{b_{(x)}}{a_{(x)}} dx}$$

Es decir:

$$e^{\int \frac{b_{(x)}}{a_{(x)}} dx} y'' + e^{\int \frac{b_{(x)}}{a_{(x)}} dx} \frac{b_{(x)}}{a_{(x)}} y' + e^{\int \frac{b_{(x)}}{a_{(x)}} dx} \left(\frac{c_{(x)}}{a_{(x)}} + \lambda \frac{d_{(x)}}{a_{(x)}}\right) y = 0$$

$$\frac{d}{dx}\left[e^{\int \frac{b_{(x)}}{a_{(x)}} dx} y'\right] + \left(\frac{c_{(x)}}{a_{(x)}} e^{\int \frac{b_{(x)}}{a_{(x)}} dx} + \lambda \frac{d_{(x)}}{a_{(x)}} e^{\int \frac{b_{(x)}}{a_{(x)}} dx}\right) y = 0$$

Que, comparando con la forma auto adjunta conocida:

$$\frac{d}{dx}\left[r_{(x)}y'\right] + \left(q_{(x)} + \lambda p_{(x)}\right)y = 0$$

Se obtiene como solución general que:

$$r_{(x)} = e^{\int \frac{b_{(x)}}{a_{(x)}}dx}, q_{(x)} = \frac{c_{(x)}}{a_{(x)}}e^{\int \frac{b_{(x)}}{a_{(x)}}dx}, p_{(x)} = \frac{d_{(x)}}{a_{(x)}}e^{\int \frac{b_{(x)}}{a_{(x)}}dx}$$

Veamos un ejemplo: imaginemos que estamos ante la ecuación de Laguerre:

$$xy'' + (1-x)y' + ny = 0, \ \ (\forall n > 0)$$

Que comparando con nuestra estructura regular del problema PSL:

$$a_{(x)}y'' + b_{(x)}y' + \left(c_{(x)} + \lambda d_{(x)}\right)y = 0$$

Vemos que:

$$a = x, b = (1-x), c = 0, d = 1$$

Y si dividimos todo por $a = x$:

$$y'' + \frac{(1-x)}{x}y' + \frac{n}{x}y = 0$$

Y multiplicando por:

$$\mu = \exp\left(\int \frac{(1-x)}{x}dx\right) = \exp(\ln x - x) = xe^{-x}$$

Nos queda que:

$$xe^{-x}y'' + xe^{-x}\frac{(1-x)}{x}y' + xe^{-x}\frac{n}{x}y = 0$$

$$xe^{-x}y'' + (e^{-x} - xe^{-x})y' + e^{-x}ny = 0$$

Lo marcado en rojo es el resultado de la derivada de un producto, a saber, el primero sin derivar por el segundo derivado más el primero derivado por el segundo sin derivar. Por ello podemos escribirlo así:

$$\frac{d}{dx}\left[xe^{-x}y'\right] + e^{-x}ny = 0$$

Donde ya vemos que paralelamente a su forma auto adjunta:

$$\frac{d}{dx}\left[r_{(x)}y'\right] + \left(q_{(x)} + \lambda p_{(x)}\right)y = 0$$

Podemos decir que:

$$r_{(x)} = xe^{-x}, q_{(x)} = 0, p_{(x)} = e^{-x}$$

Donde $p_{(x)} = e^{-x}$ es el indicador que marca la relación de ortogonalidad entre las soluciones. Dicha relación de ortogonalidad se vería demostrada por el producto interior:

muy concreto de ecuaciones diferenciales. Recodemos que al separar las variables nos hemos topado con una parte puramente espacial e independiente del tiempo y otra totalmente temporal e independiente del espacio. La solución de la última, la ecuación dependiente del tiempo, no reviste mucha dificultad. Sin embargo, la primera, la espacial, que encierra algo más de dificultad, al tratarse de un caso del problema de Stürm-Liouville podemos resolver fácilmente y, además, considerar que no dejamos ninguna solución fuera habiendo procedido como tal y como estamos procediendo.

Veamos la aplicación de todo esto en un ejemplo.

Imaginemos que, estudiando la energía, estamos ante dos soluciones válidas para la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (la parte espacial una vez separadas las variables):

$$\widehat{H}X_1 = E_1X_1 \;\; ; \;\; \widehat{H}X_2 = E_2X_2$$

Donde, naturalmente, E_1 y E_2 son soluciones distintas (insistimos, recordemos que X_x es la parte exclusivamente espacial, una vez separada, de la función $\psi_{(x,t)}$ candidata a satisfacer la ecuación).

Construyamos, a partir de esto que tenemos, la función de onda $\psi_{(x,t)}$. Recordemos que, para la parte espacial, habíamos llegado a:

$$\langle y_n|y_m\rangle = \int_a^b p_{(x)}y_n y_m\,dx = 0$$

$$\psi_{(x,t)} = \sum_j C_j X_{(x)}\, e^{-i\frac{K_j t}{\hbar}}$$

Veamos entonces para este caso[71]:

$$\psi_{(x,t=0)} = c_1 X_{1\,(x)} + c_2 X_{2\,(x)}$$

$$\psi_{(x,t=0)} = c_1 X_{(1)} e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + c_2 X_{(2)} e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}}$$

Analicemos la energía. Sabemos que el valor esperado para el Hamiltoniano es:

$$\langle \widehat{H} \rangle = \int \psi^*\, \widehat{H}\, \psi\, dx$$

Luego, sustituyendo por lo que tenemos:

$$\langle \widehat{H} \rangle = \int \left(c_1 X_{(1)} e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + c_2 X_{(2)} e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right)^* \widehat{H} \left(c_1 X_{(1)} e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + c_2 X_{(2)} e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) dx$$

$$\langle \widehat{H} \rangle = \int \left(c_1 X^*_{(1)} e^{i\frac{E_1 t}{\hbar}} + c_2 X^*_{(2)} e^{i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) \widehat{H} \left(c_1 X_{(1)} e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + c_2 X_{(2)} e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) dx$$

$$\langle \widehat{H} \rangle = \int \left(c_1 X^*_{(1)} e^{i\frac{E_1 t}{\hbar}} + c_2 X^*_{(2)} e^{i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) \left(c_1 \widehat{H} X_{(1)} e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + c_2 \widehat{H} X_{(2)} e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) dx$$

[71] Que, claro, para $t = 0$ queda como:

$$\psi_{(x,t=0)} = c_1 X_{(1)} \cdot 1 + c_2 X_{(2)} \cdot 1$$

Y como sabemos que el Operador Hamiltoniano no hace nada a la parte temporal a la que antecede, y sabemos que $\widehat{H}X_{(x)} = E_{(x)}X_{(x)}$, podemos expresar como:

$$\langle \widehat{H} \rangle = \int \left(c_1 X^*_{(1)} e^{i\frac{E_1 t}{\hbar}} + c_2 X^*_{(2)} e^{i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) \left(c_1 E_{(1)} X_{(1)} e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + c_2 E_{(2)} X_{(2)} e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) dx$$

Expandamos el producto:

$$\langle \widehat{H} \rangle = \int \left[c_1 X^*_{(1)} e^{i\frac{E_1 t}{\hbar}} c_1 E_{(1)} X_{(1)} e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + c_1 X^*_{(1)} e^{i\frac{E_1 t}{\hbar}} c_2 E_{(2)} X_{(2)} e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} + c_2 X^*_{(2)} e^{i\frac{E_2 t}{\hbar}} c_1 E_{(1)} X_{(1)} e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + c_2 X^*_{(2)} e^{i\frac{E_2 t}{\hbar}} c_2 E_{(2)} X_{(2)} e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right] dx$$

Que podemos agrupar un poco más estéticamente:

$$\langle \widehat{H} \rangle = \int \left[c_1^2 \left(X^*_{(1)} E_{(1)} X_{(1)} e^{i\frac{E_1 t}{\hbar}} e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} \right) + c_1 c_2 \left(X^*_{(1)} E_{(2)} X_{(2)} e^{i\frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}} \right) + c_2 c_1 \left(X^*_{(2)} E_{(1)} X_{(1)} e^{i\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}} \right) + c_2^2 \left(X^*_{(2)} E_{(2)} X_{(2)} e^{i\frac{E_2 t}{\hbar}} e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) \right] dx$$

Donde la parte dependiente del tiempo resaltada en rojo es igual a 1 y se va, es decir, nos queda[72]:

$$\langle \widehat{H} \rangle = \int \begin{bmatrix} c_1^2 \left(X^*_{(1)} E_{(1)} X_{(1)} \right) + c_2^2 \left(X^*_{(2)} E_{(2)} X_{(2)} \right) \\ + c_1 c_2 \left(X^*_{(1)} E_{(2)} X_{(2)} e^{i\frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}} \right) + c_2 c_1 \left(X^*_{(2)} E_{(1)} X_{(1)} e^{i\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}} \right) \end{bmatrix} dx$$

Que podemos reordenar y como:

[72] Ojo, lo no marcado en rojo no se va porque se cruzan E_1 y E_2.

$$\langle \widehat{H} \rangle = \int \left[c_1^2 \left(X_{(1)}^* X_{(1)} E_{(1)} \right) + c_2^2 \left(X_{(2)}^* X_{(2)} E_{(2)} \right) \right] dx$$

$$+ \int \left[c_1 c_2 \left(X_{(1)}^* X_{(2)} E_{(2)} e^{i\frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}} \right) + c_2 c_1 \left(X_{(2)}^* X_{(1)} E_{(1)} e^{i\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}} \right) \right] dx$$

La primera integral la podemos escribir así (sacando del integrando los términos no dependientes de x):

$$\langle \widehat{H} \rangle = c_1^2 E_{(1)} \int \left(X_{(1)}^* X_{(1)} \right) dx + c_2^2 E_{(2)} \int \left(X_{(2)}^* X_{(2)} \right) dx$$

$$+ \int \left[c_1 c_2 \left(X_{(1)}^* X_{(2)} E_{(2)} e^{i\frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}} \right) + c_2 c_1 \left(X_{(2)}^* X_{(1)} E_{(1)} e^{i\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}} \right) \right] dx$$

Y como sabemos que la función está normalizada y, por ello, la probabilidad total (lo marcado en azul) es igual a 1, podemos seguir reescribiendo como:

$$\langle \widehat{H} \rangle = c_1^2 E_{(1)} \cdot 1 + c_2^2 E_{(2)} \cdot 1$$

$$+ \int \left[c_1 c_2 \left(X_{(1)}^* X_{(2)} E_{(2)} e^{i\frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}} \right) + c_2 c_1 \left(X_{(2)}^* X_{(1)} E_{(1)} e^{i\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}} \right) \right] dx$$

Y, sobre la segunda integral, podemos decir que todo, excepto las $X_{(x)}$, son independientes de x, por lo que podemos sacarlas de la integral:

$$\langle \widehat{H} \rangle = c_1^2 E_{(1)} + c_2^2 E_{(2)}$$

$$+ c_1 c_2 E_{(2)} e^{i\frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}} \int \left(X_{(1)}^* X_{(2)} \right) dx + c_2 c_1 E_{(1)} e^{i\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}} \int \left(X_{(2)}^* X_{(1)} \right) dx$$

Pero resulta que lo que hemos marcado ahora en azul es igual a cero ya que hemos visto que es una instancia del Problema de Stürm-Liouville que establece que las soluciones son bases linealmente independientes por lo que, finalmente:

$$\langle \widehat{H} \rangle = c_1^2 E_{(1)} + c_2^2 E_{(2)}$$
$$+c_1 c_2 E_{(2)} e^{i\frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}} \cdot 0 + c_2 c_1 E_{(1)} e^{i\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}} \cdot 0$$

Es decir, que el valor esperado para el operador Hamiltoniano[73], es:

$$\langle \widehat{H} \rangle = c_1^2 E_{(1)} + c_2^2 E_{(2)}$$

Para cerrar el capítulo, es interesante anticipar qué tipo de problemas nos encontramos en Mecánica cuántica y cómo usamos estas herramientas para resolverlos.

1. Se nos presenta un sistema físico, por ejemplo, una partícula en una caja.

[73] El Hamiltoniano aquí está relacionado con el cambio de energía según el cambio de posición.

2. Se identifica el potencial del sistema.
3. Se resuelve la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para ese potencial y se obtienen, así, los estados estacionarios y sus energías.
4. Se identifican las condiciones iniciales como la suma de los estados estacionarios encontrados.
5. Se añade la dependencia del tiempo para cada estado estacionario.

El potencial como condicionante de la Ecuación de Schrödinger. La partícula en la caja.

Hemos visto estrategias para resolver la Ecuación de Schrödinger que, por otro lado, no es una expresión especialmente difícil de resolver. ¿Quiere decir que ya hemos terminado? Por supuesto que no. No hay una sola Ecuación de Schrödinger sino muchas. Concretamente, una por cada estado físico con Energía potencial ($E_{P(x)}$ que sabemos que es una función del espacio (notaka, revisar arriba si lo hemos puesto así…) diferente. Es, efectivamente, el potencial el que determina la forma de resolver la Ecuación y el que determina la forma de la Función de onda que la resuelve.

Veamos qué tipo de relación se establece entre el potencial y nuestra Ecuación. Recordémosla en su forma independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} + E_{P(x)}\psi_{(x)} = E\psi_{(x)}$$

De esta expresión podríamos decir que:

a. Lo remarcado en color rojo es la energía del estado. Tengamos en consideración que lo que hemos denominado E es lo que hemos venido hasta ahora K y que no es otra cosa que la constate de separación de variables.
b. Lo marcado en azul es algo así como la energía cinética.
c. Lo marcado en verde sería la energía potencial del sistema. A partir de ahora, para su concordancia con los libros de texto, llamaremos a este potencial: $V_{(x)}$.

Acerquémonos ahora a la Ecuación desde una perspectiva centrada en el potencial.

La parte del potencial: $E_{P(x)}\psi_{(x)}$, recoge información muy importante sobre el estado cuántico. Por ejemplo, si para una posición x determinada, el potencial arroja un valor muy alto y la función también lo hace, querrá decir que habrá muchas posibilidades de que la partícula colapse en una zona de alto potencial.

Veamos qué efecto tiene el potencial en la Función de onda. Para ello, manipulemos un poco nuestra expresión:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} + V_{(x)}\psi_{(x)} = E\psi_{(x)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} = E\psi_{(x)} - V_{(x)}\psi_{(x)}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} = V_{(x)}\psi_{(x)} - E\psi_{(x)}$$

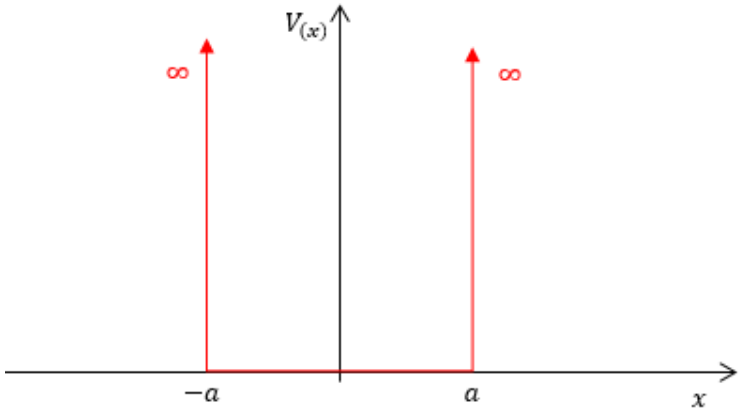
$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} = \left(V_{(x)} - E\right)\psi_{(x)}$$

$$\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V_{(x)} - E\right)\psi_{(x)}$$

Donde lo marcado en rojo es el factor de relación entre la segunda derivada respecto al espacio de una función y la función misma. Si $V_{(x)} > E$, la relación tendrá signo positivo. Si $V_{(x)} < E$, negativo.

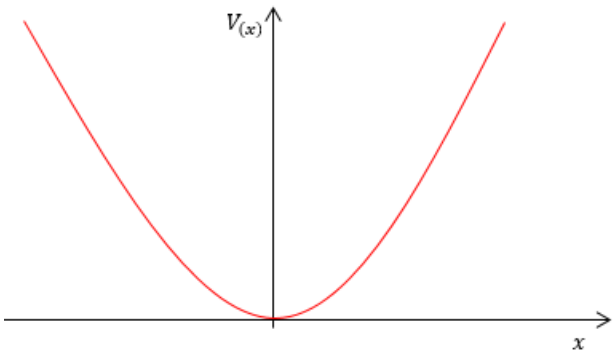
Vamos a ver qué tipo de escenarios, en los que el potencial afecta al tipo de Ecuación de Schrödinger, son los habituales.

1. Partícula en una caja (de paredes duras o pozo cuadrado infinita profundidad).



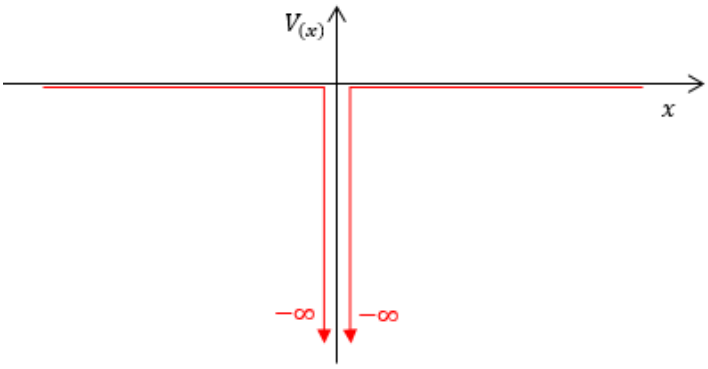
   La partícula estaría encerrada en una zona de la que no puede escapar ya que no puede superar una barrera de potencial infinito.

2. Oscilador armónico (tipo muelle).



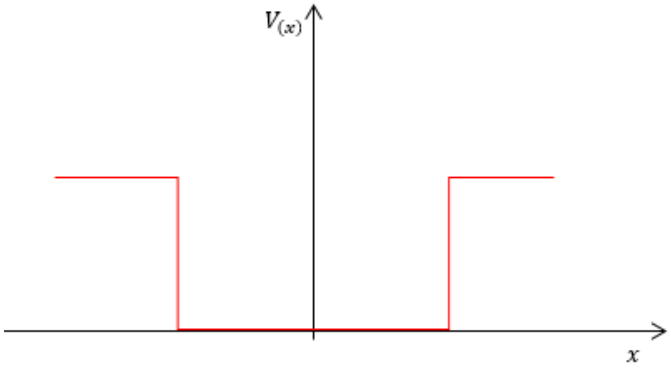
El potencial se distribuye según una función $\sim x^2$.

3. Función δ:



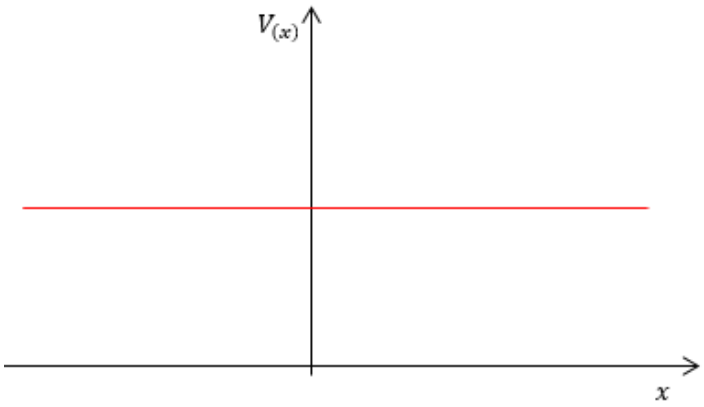
Sí, el potencial puede ser negativo. En este caso, la partícula debería estar comprendida en alguna zona tipo δ de Dirac.

4. Partícula en una caja de pareces *blandas*.



La partícula podría escapar de una caja de paredes *porosas* a través de un determinado potencial.

5. Potencial constante.

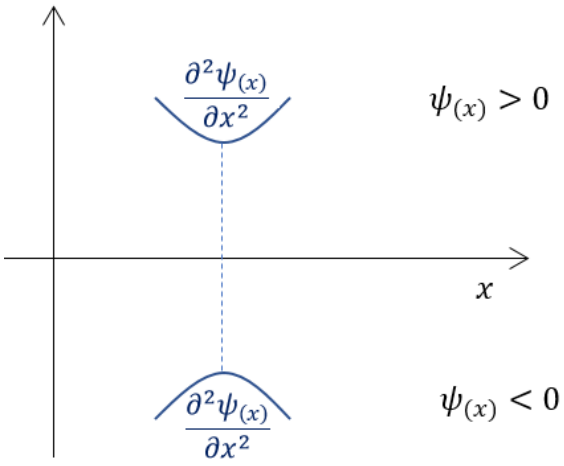


Como decimos, estos diferentes tipos de potenciales afectarán al modo en que se *manifiesta* la Ecuación de Schrödinger.

Antes de abordar como ejemplo un caso de partícula en una caja de paredes duras, recordemos un par de detalles de cosas que seguro que nos suenan de la época del instituto. Para ello traigamos de nuevo nuestra Ecuación de Schrödinger:

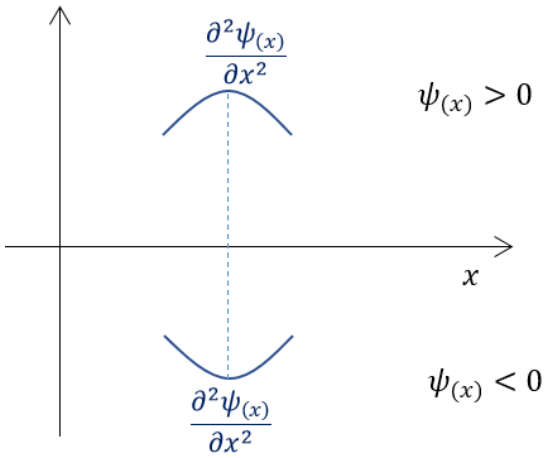
$$\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V_{(x)} - E\right)\psi_{(x)}$$

Si $V_{(x)} > E$, entonces, la segunda derivada, cuyo signo, recordemos que nos habla de la concavidad/convexidad de una función, nos dibuja un escenario de este tipo:

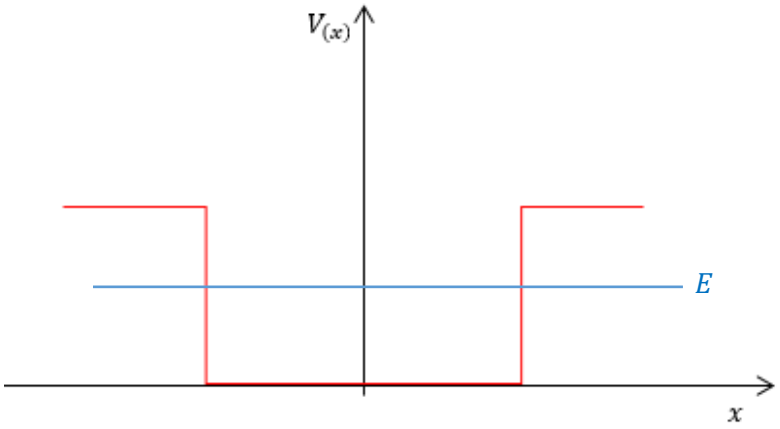


Es decir, la gráfica presentaría curvaturas que *se alejan* del eje de abscisas.

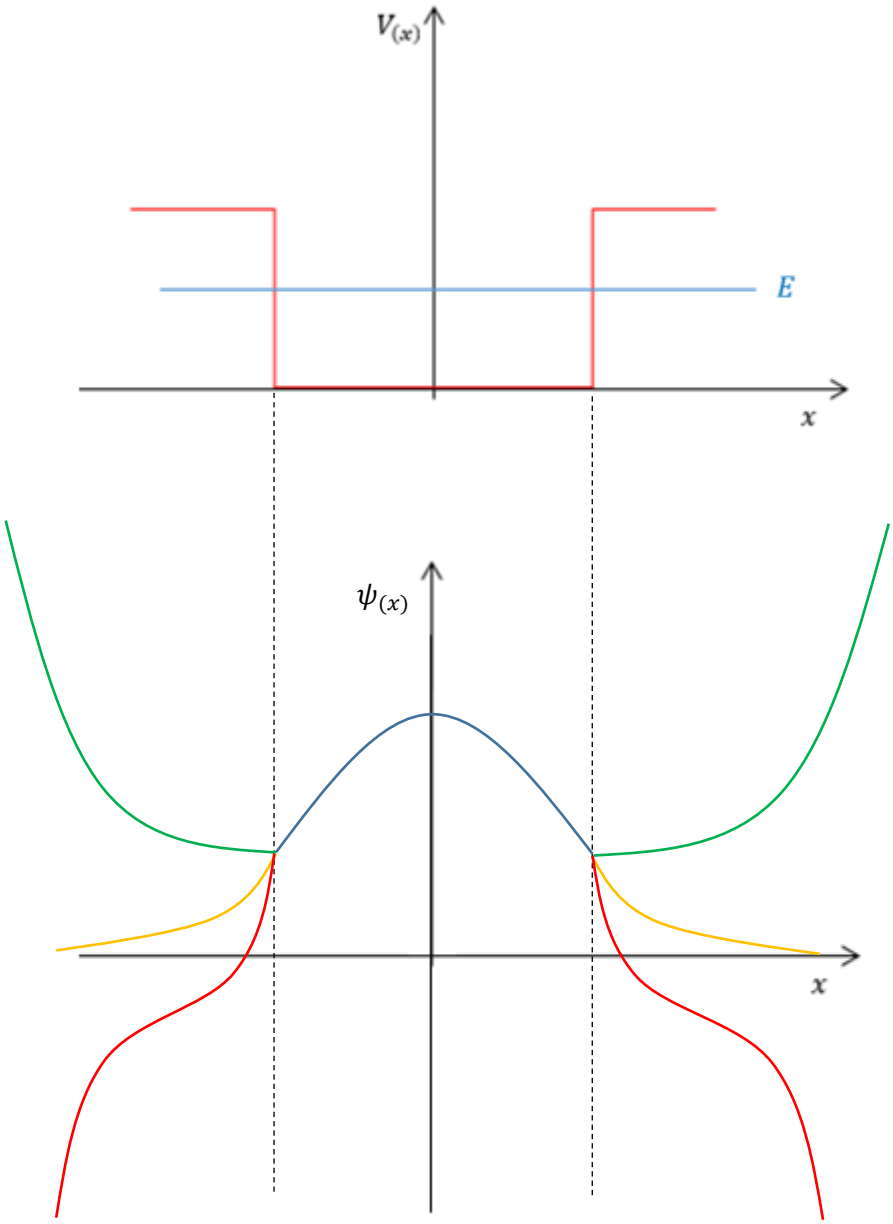
Por el contrario, si $V_{(x)} < E$, las curvaturas de las gráficas *se acercarían* hacia el eje.



Sólo con esto podemos obtener información interesante. Por ejemplo, imaginemos un estado con este potencial y esta energía total:



Sólo observando, podríamos anticipar los siguientes escenarios para la función (usemos varios colores para distinguir los escenarios:



En la zona comprendida entre las fronteras de la caja (presupongamos una $\psi_{(x)} > 0$), puesto que $V_{(x)} < E$, necesariamente, como ya hemos visto, la curvatura debe ser hacia el eje y así hemos trazado la gráfica azul. ¿Qué puede pasar fuera de esa zona?

a. Verde. Que crezca estrictamente con mayor o menor velocidad.
b. Rojo. Que decrezca estrictamente y, al pasar $\psi_{(x)}$ por debajo del eje, se convierta en negativa y, consecuentemente, cambie el

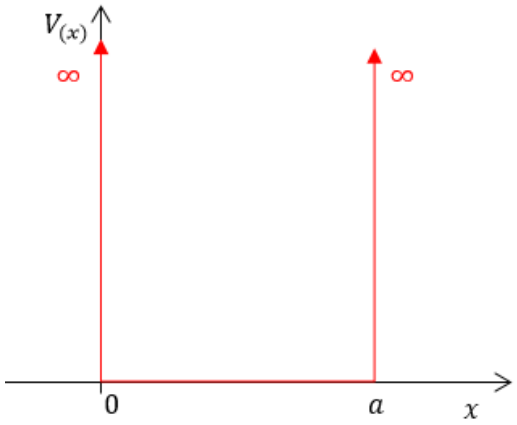
signo de la segunda derivada y por ello cambie el tipo de curvatura.

c. Naranja. Que decrezca asintóticamente hacia el eje x.

Sólo este tercer escenario nos expone una función $\psi_{(x)}$ de área integrable finita y, por ello, normalizable.

También podemos encontrarnos con funciones sinusoidales que siempre curven *hacia el eje* en un baile de crecimiento y decrecimiento.

Vamos a hacer un caso concreto de partícula en una caja *de paredes duras* y veamos cómo las condiciones de frontera definen el escenario. Supongamos que el potencial de un estado está definido así:



$$V_{(x)} = \begin{cases} 0 \; si \; 0 \leq z \leq a \\ \\ \infty \quad otherwise \end{cases}$$

Tomemos nuestra Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} + V_{(x)}\psi_{(x)} = E\psi_{(x)}$$

Obviamente, para toda x fuera de la caja la Ecuación no tiene sentido ya que implicaría un potencial infinito. Sólo tiene sentido cuando el potencial es $V_{(x)} = 0$, es decir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} + 0 \cdot \psi_{(x)} = E\psi_{(x)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} = E\psi_{(x)}$$

Despejemos la segunda derivada:

$$\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{(x)}$$

Ahora un pequeño truco, como sabemos que la ecuación diferencial para un oscilador armónico es del tipo:

$$\frac{\partial^2 U_{(x)}}{\partial t^2} = -K^2 U_{(x)}$$

Arrimemos el ascua a nuestra sardina diciendo que en nuestro caso K^2 encierra todo aquello que no está en función de x:

$$K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \rightarrow K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Luego:

$$\frac{\partial^2 \psi_{(x)}}{\partial x^2} = -K^2 \psi_{(x)}$$

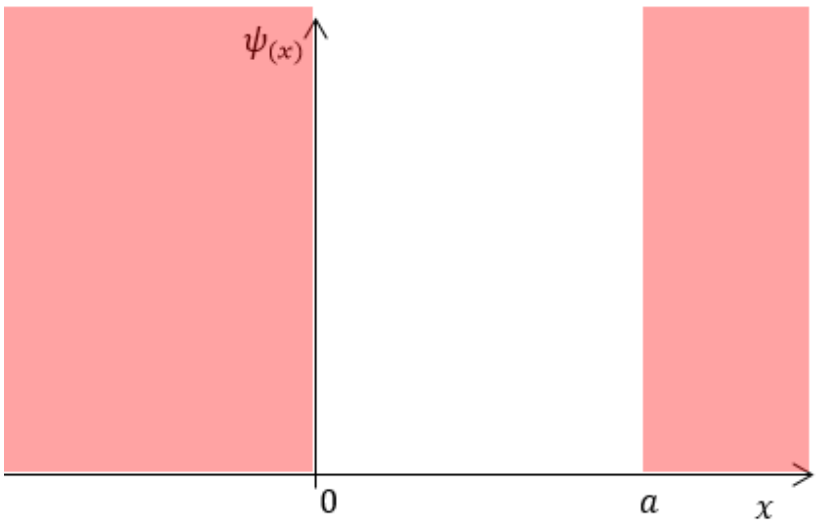
Que, como todo está en función de x, escribimos como:

$$\frac{d^2 \psi_{(x)}}{dx^2} = -K^2 \psi_{(x)}$$

Es decir, una ecuación diferencial ordinaria (como hemos dicho, la de oscilador armónico simple) cuya solución tipo conocemos:

$$\psi_{(x)} = A \sin(Kx) + B \cos(Kx)$$

Para saber qué son A, B y K (de K, lo que realmente nos interesa es E), analicemos las condiciones de frontera. En ese sentido es obvio que hay dos zonas en las que $\psi_{(x)}$ no puede estar:



Y A, B y K deben obedecer a esto[74]. Naturalmente, las condiciones de frontera son:

$$\psi_{(0)} = 0; \psi_{(a)} = 0$$

Veamos qué efecto producen en nuestra expresión:

$$\psi_{(x)} = A\,\mathrm{sin}(Kx) + B\,\mathrm{cos}(Kx)$$

$$\psi_{(0)} = A\,\mathrm{sin}(K \cdot 0) + B\,\mathrm{cos}(K \cdot 0) = 0$$

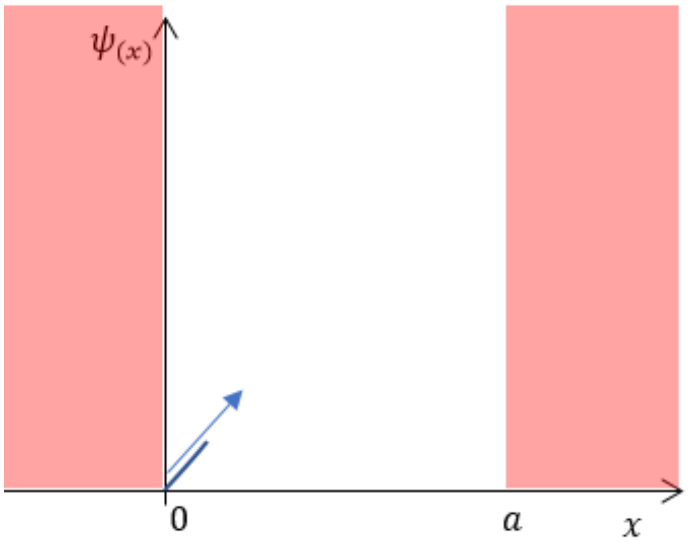
$$\psi_{(0)} = A \cdot 0 + B \cdot 1 = 0$$

Y para que esto se cumpla, necesariamente:

$$B = 0$$

$$\psi_{(x)} = A\,\mathrm{sin}(Kx)$$

Es decir, no hay soluciones de coseno. Eso nos da otra pista:



[74] Algo que sabemos también de la función es que es continua. Debe ser continua porque no tiene sentido físico que la función que describa el estado presente huecos o saltos. Ello haría que operadores como el de momento $\hat{p}$ perdiera totalmente su sentido. La función es continua, es decir, 0 y a deben estar conectados.

Sabiendo esto, vayamos a la segunda condición de frontera:

$$\psi_{(a)} = 0$$

Sustituimos en lo que ya sabemos:

$$\psi_{(x)} = A\sin(Kx)$$
$$\psi_{(a)} = A\sin(K \cdot a) = 0$$

Esto implica, pues tratamos con un seno, que necesariamente[75]:

$$Ka = n\pi$$

Donde n no es ni cero ni negativo[76]. Así:

$$Ka = n\pi \rightarrow K = \frac{n\pi}{a}$$
$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a = n\pi \rightarrow \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{n\pi}{a}$$

Aquí, todo son parámetros dependientes de la propia evolución del sistema de manera que lo único que nos interesa despejar es E:

[75] Considerar que $A = 0$ es solución trivial.

[76] No puede ser cero porque estamos en a, en la segunda frontera y no es necesario que consideremos los n negativos porque el seno es una función impar, es decir que:

$$\sin(-x) = -\sin(x)$$

Esta condición será absorbida por A.

$$E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

Que siendo n un entero positivo, nos marca, de manera muy gráfica, la naturaleza cuántica de la energía del estado.

Volvamos la Ecuación que caracteriza al estado[77]:

$$\psi_{n(x)} = A\sin(Kx)$$
$$\psi_{n(x)} = A\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

Donde A es la constante de normalización de la función de onda. Calculémosla. Para ello sabemos que para normalizar establecemos que:

$$\left|\psi_{(x)}\right|^2 = \int_0^a \psi^*_{(x)}\,\psi_{(x)}dx = 1$$

Como no hay parte imaginaria sino que la función es puramente real, tenemos que:

$$\int_0^a A\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)A\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = 1$$

$$\int_0^a A^2\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = 1$$

[77] Obsérvese que ya decimos $\psi_{n(x)}$, es decir, sub n, porque la función ya no es un continuo, sino que se define de maneras diferentes para cada estado de energía discreto del sistema.

$$A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = 1$$

Esta integral definida se resuelve como:

$$A^2 \frac{a}{2} = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Es decir, que la Función de onda que satisface la Ecuación de Schrödinger de nuestro sistema es[78]:

$$\psi_{n(x)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

Veámoslo en funcionamiento. Tenemos, entonces, una serie de niveles de energía:

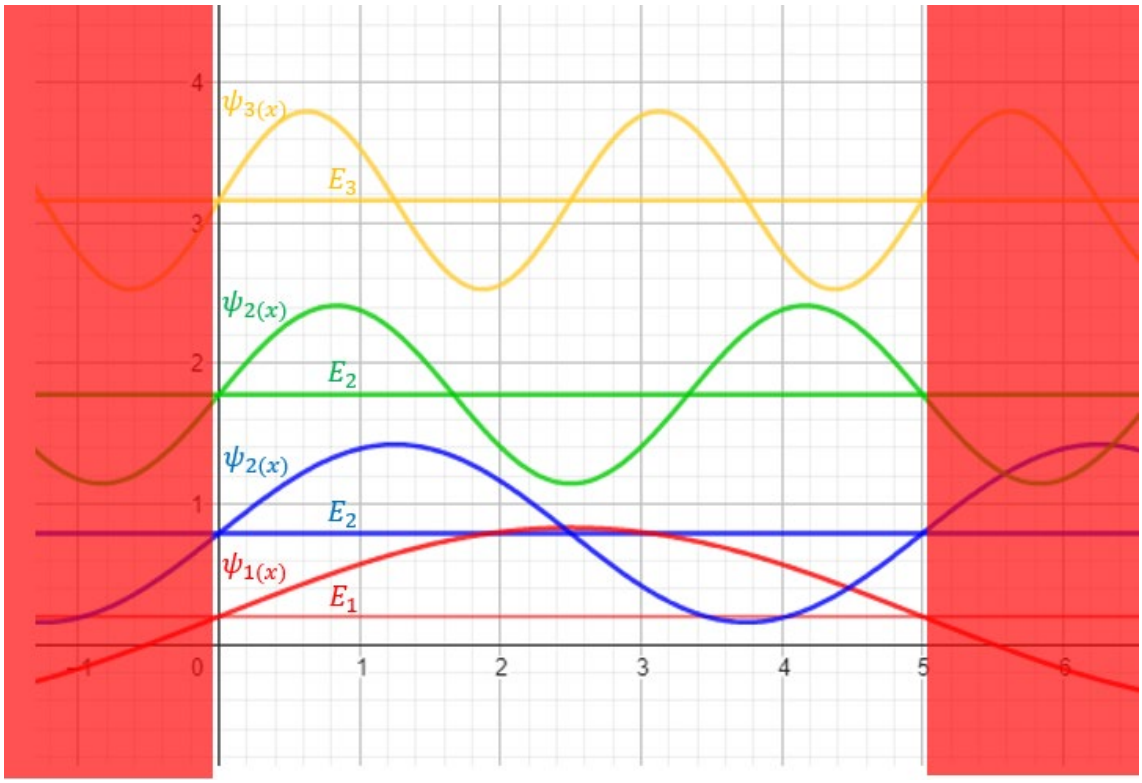
$$E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

Y una función de onda para cada uno de ellos:

$$\psi_{n(x)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

[78] Recordemos que a es una distancia espacial cualquiera sobre el eje x y m la masa de la partícula, es decir, datos que nos aporta la propia naturaleza del sistema.

Usando diferentes colores para diferentes estados cuánticos de energía y sus funciones de onda asociadas, todo esto, gráficamente, se representa así[79]:



Es hermoso poder ver la naturaleza cuántica de la naturaleza. Es magnífica la coherencia con la que el Dios de Spinoza se expresa.

Deus sive natura.

[79] Para que el gráfico fuera ilustrativo hemos usado:

$$a = 5$$

$$m = \hbar^2$$

Por otro lado, hemos sombreado en rojo las zonas prohibidas.

Introduzcamos ahora en nuestro modelo la evolución del tiempo. Para ello, y esto es muy importante pues estamos tratando con funciones complejas[80], sabemos que la normalización de las mismas se impone de la siguiente manera:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*_{(x)} \psi_{(x)}\, dx = 1$$

Por otro lado, como también sabemos, hemos encontrado un conjunto de funciones $\psi_{n(x)}$ que son soluciones *ortogonales* para la Ecuación de Schrödinger. El modo en que forzamos dicha naturaleza, para dos funciones que son soluciones diferentes, recordemos que es:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*_{(x)} g_{(x)}\, dx = 0$$

Es decir, como nuestras diferentes funciones son $\psi_{n(x,t)}$, impondremos que[81]:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*_{n(x)} \psi_{m(x)}\, dx = 0$$

Comprobémoslo con nuestro conjunto de soluciones (para cada n tenemos una solución distinta).

[80] Importante: al ser funciones complejas, tenemos que usar como primer elemento del producto interno el conjugado $\psi^*_{n(x)}$.

[81] Insistimos, pues esto nos despistó en más de una ocasión, de nuevo tenemos que multiplicar por la izquierda con un conjugado complejo $\psi^*_{n(x)}$. Por otro lado, hemos usado el subíndice m en la función de la derecha para indicar que estamos hablando de otra función diferente, una solución ortogonal diferente.

$$\psi_{n(x)} = \sqrt{2/a}\,\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

Estudiemos la ortogonalidad entre funciones del conjunto (y, de paso, veremos que también su normalización)[82].

$$\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)dx = 0$$

Siempre que $n \neq m$.

Por propiedades trigonométricas que ya hemos usado y conocemos[83], y cuyo desarrollo no nos aportaría demasiado ahora, podemos reescribir nuestra integral como:

$$\frac{1}{2}\int_0^a \cos\left((n-m)\frac{\pi}{a}x\right) - \cos\left((n+m)\frac{\pi}{a}x\right)dx = 0$$

Como sabemos que necesariamente $n \neq m$, pues, si no, se trataría de la misma función, $n \pm m$ nunca será igual a cero[84]. Resolvamos la integral:

[82] El siguiente conjugado $\psi^*_{n(x)}$, como no tiene parte imaginaria, permanece sin cambio. Además, para simplificar los desarrollos, al tratarse de funciones seno, optamos por quitar $\sqrt{2/a}$.

[83] Véase *Desigvaldades de Bell*, de Iohannes Svlis.

$$\sin(x)\sin(y) = \frac{1}{2}(\cos(x-y) - \cos(x+y))$$

[84] Cuando $n = m$ será la misma función y en vez de estudiar la ortogonalidad de dos funciones estaremos estudiando la normalización de una función. Después veremos que estamos ante el δ de Krönecker.

$$\frac{1}{2}\left(\frac{a}{(n-m)\pi}\sin\left(\frac{(n-m)\pi}{a}x\right)-\frac{a}{(n+m)\pi}\sin\left(\frac{(n+m)\pi}{a}x\right)\right)\Bigg|_0^a=0$$

$$\frac{1}{2}\left(\frac{a}{(n-m)\pi}\sin\left(\frac{(n-m)\pi}{a}a\right)-\frac{a}{(n+m)\pi}\sin\left(\frac{(n+m)\pi}{a}a\right)\right)$$
$$-\frac{1}{2}\left(\frac{a}{(n-m)\pi}\sin\left(\frac{(n-m)\pi}{a}0\right)-\frac{a}{(n+m)\pi}\sin\left(\frac{(n+m)\pi}{a}0\right)\right)$$

Lo marcado en color rojo se anula y solo nos queda:

$$\frac{a}{2\pi}\left[\frac{\sin\big((n-m)\pi\big)}{n-m}-\frac{\sin\big((n+m)\pi\big)}{n+m}\right]=0$$

Que, obviamente, son senos con argumentos múltiplos de π y, por ello, nuestra expresión es igual a cero, demostrando la igualdad propuesta como verdadera o, lo que es lo mismo: $\psi_{n(x)}$ y $\psi_{m(x)}$, son ortogonales.

Además, como hemos adelantado en la nota 84, estamos ante una Delta de Krönecker pues dependiendo de si $n \neq m$ o $n = m$, estaríamos estudiando la ortogonalidad o la normalidad[85], ya que:

$$\int_0^a \psi^*_{n(x)}\psi_{m(x)}\,dx=\delta_{n,m}$$

$$\delta_{n,m}=\begin{cases}1\ si\ m=n\\ \\ 0\ si\ m\neq n\end{cases}$$

[85] Perfectamente lógico, entonces, que el primer producto sea $\psi^*_{n(x)}$ ya que si $n = m$, el segundo producto sería $\psi_{n(x)}$, siendo este el modo en que estudiamos la normalidad.

Sigamos avanzando hacia la ínclusión del tiempo. Para ello tendremos que incluir las condiciones iniciales en el análisis de nuestro sistema. ¿Cómo podemos hacer esto? Desde el análisis de Fourier (véase notaka 60?) recibimos una incomensurable aportación[86]. Estemos atentos porque es francamente hermoso.

Recordemos que ya hemos alcanzado un conjunto de funciones tipo senon ortogonales, suaves, continuas y normalizables que son soluciones para la Ecuación de Schrödinger. Imaginemos que, con idependencia de esto, tenemos una función de x, en principio cualquier otra, que queremos expresar mediante el conjunto de funciones seno que ya conocemos. Algo así como expresar esa otra función $f_{(x)}$ mediante los ladrillos lingüisticos que ya hemos demostrado viables para resolver la Ecuación de Schrödinger. En realidad sería parecido a *inyectar* dicha función un en las soluciones válidad. Bien, desde el análisis de Fourier, podemos hacer esto de una manera muy simple. Veamos, queremos hacer esto:

$$f_{(x)} = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

Expresar $f_{(x)}$ mediante la suma de soluciones estacionarias ya obtenidas para nuestra particle-in-a-box. Para inocular dicha función (que no es otra cosa que la función que expresa las Condiciones Iniciales de nuestro sistema), podemos hacer lo siguiente (lo marcamos en rojo):

$$\int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \cdot f_{(x)}\, dx = \int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \cdot \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx$$

[86] Qué afortunados somos, en nuestro tiempo, por poder alzarnos a los hombros de gigantes.

Esto lo podemos reescribir como:

$$\int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\cdot f_{(x)}\,dx = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

Lo marcado en color azul siempre es cero pues, como acabamos de ver, son funciones ortogonales. Sólo sobrevive en un caso: cuando $n = m$, en cuyo caso[87]:

$$\int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\cdot f_{(x)}\,dx = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

$$\int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\cdot f_{(x)}\,dx = C_m \int_0^a \sin^2\left(\frac{m\pi}{a}x\right)dx$$

Lo azul parece un estudio de normalidad[88]. Resolvamos para despejar C_m:

$$\int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\cdot f_{(x)}\,dx = C_m\frac{a}{2}$$

[87] Naturalmente desaparece el sumatorio pues solo hay un caso. Para denotar que estamos en el caso en que $n = m$, vamos a llamar a n, m.

[88] Claro, no hay asterisco como superíndice porque la función es puramente real, sin parte imaginaria.

De donde:

$$C_m = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\cdot f_{(x)}\,dx$$

Donde C_m es el valor de la constante que consigue *bailar al ritmo oportuno* para que nuestro cojunto de soluciones de estados estacionarios[89] expresen la función $f_{(x)}$ que recoge los datos acerca de las condiciones iniciales del sistema que estamos estudiando. Es decir, hemos conseguido *inocular* una función a nuestro conjunto de soluciones. Esto es lo que haremos para introducir la función que contenga las condiciones iniciales. Señalamos en rojo lo que serán las condiciones iniciales y en azul el conjunto de soluciones de estado estacionario[90]:

$$f_{(x)} = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

Procedamos, entonces, a añadir las condiciones iniciales y, así, la parte temporal.

[89] En realidad, siendo matemáticamente rigurosos, esto conforma un conjunto de soluciones para funciones ortogonales, suaves, continuas y normalizables. Las otras, en definitiva, no describen sistemas físicos reales.

[90] Con carácter general, incluido el tiempo, sería:

$$f_{(x,t)} = \sum_{n=1}^{\infty} C_n\,\psi_{n(x,t)}$$

Y:

$$C_n = \int_0^a \psi^*_{n(x,t)}\cdot f_{(x,t)}dx$$

Recordemos, estamos con funciones complejas. El primer producto debe ser el conjugado complejo.

¿Qué hemos consolidado ya en referencia a nuestra partícula en la caja?

$$\psi_{n(x)} = \sqrt{2/a}\,\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

Añadamos ahora la parte temporal (la resaltamos en rojo):

$$\psi_{n(x,t)} = \sqrt{2/a}\,\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\cdot e^{-i\frac{n^2\pi^2\hbar^2 t}{2ma^2\ \hbar}}$$

Y las condiciones iniciales[91] (obtenidas mediante resultados experimentales):

$$\psi_{(x,0)} = \begin{cases} \sqrt{3/a}\left(1 - \left|\dfrac{x - a/2}{a/2}\right|\right) si\ 0 \le x \le a \\ 0 \qquad para\ el\ resto\ de\ casos \end{cases}$$

Procedamos a inyectarlas. Recordemos:

$$f_{(x,t)} = \sum_{n=1}^{\infty} C_n\,\psi_{n(x,t)}$$

$$C_n = \int_0^a \psi^*_{n(x,t)}\cdot f_{(x,t)}dx$$

[91] Obsérvese que no tiene subíndice n. No es una solución más, sino una condición inicial.

Es decir:

$$\psi_{(x,0)} = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \, \psi_{n(x,0)}$$

$$C_n = \int_0^a \psi^*_{n(x,0)} \cdot \psi_{(x,0)} dx$$

Donde:

$$\psi_{n(x,t)} = \sqrt{2/a} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \cdot e^{-i\frac{n^2\pi^2\hbar^2 t}{2ma^2\ \hbar}}$$

$$\psi^*_{n(x,t)} = \sqrt{2/a} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \cdot e^{i\frac{n^2\pi^2\hbar^2 t}{2ma^2\ \hbar}}$$

$$\psi_{(x,0)} = \begin{cases} \sqrt{3/a}\left(1 - \left|\frac{x - a/2}{a/2}\right|\right) si\ 0 \leq x \leq a \\ 0 \qquad para\ el\ resto\ de\ casos \end{cases}$$

Es decir:

$$C_n = \int_0^a \psi^*_{n(x,0)} \cdot \psi_{(x,0)} dx$$

$$C_n = \int_0^a \left(\sqrt{2/a} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \cdot e^{i\frac{n^2\pi^2\hbar^2 t}{2ma^2\ \hbar}}\right) \cdot \left(\sqrt{3/a}\left(1 - \left|\frac{x - a/2}{a/2}\right|\right)\right) dx$$

Pero, como estamos en las condiciones inciales, es decir, $t = 0$, la parte en azul[92] nos queda como:

[92] Obsérvese que es el conjugado complejo. A la i se le ha cambiado el signo.

$$C_n = \int_0^a \left(\sqrt{2/a}\,\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\cdot e^{i\frac{n^2\pi^2\hbar^2 0}{2ma^2\ \hbar}}\right)\cdot\left(\sqrt{3/a}\left(1-\left|\frac{x-a/2}{a/2}\right|\right)\right)dx$$

$$C_n = \int_0^a \left(\sqrt{2/a}\,\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\cdot e^{0}\right)\cdot\left(\sqrt{3/a}\left(1-\left|\frac{x-a/2}{a/2}\right|\right)\right)dx$$

$$C_n = \int_0^a \left(\sqrt{2/a}\,\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\cdot 1\right)\cdot\left(\sqrt{3/a}\left(1-\left|\frac{x-a/2}{a/2}\right|\right)\right)dx$$

Y, ahora, para soslayar la dificultad adicional que supone un valor absoluto, dividiremos las condiciones iniciales en tres segmentos[93]:

$$\psi_{(x,0)} = \begin{cases} \sqrt{3/a}\left(1-\dfrac{a/2-x}{a/2}\right) si\ 0<x<\dfrac{a}{2} \\ \sqrt{3/a}\left(1-\dfrac{x-a/2}{a/2}\right) si\ \dfrac{a}{2}<x<a \\ 0 \qquad para\ el\ resto\ de\ casos \end{cases}$$

Es decir, que nuestra integral queda como[94]:

$$C_n = \int_0^{\frac{a}{2}} \left(\sqrt{2/a}\,\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right)\cdot\left(\sqrt{3/a}\left(1-\frac{a/2-x}{a/2}\right)\right)dx$$

$$+\int_{\frac{a}{2}}^a \left(\sqrt{2/a}\,\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right)\cdot\left(\sqrt{3/a}\left(1-\frac{x-a/2}{a/2}\right)\right)dx$$

[93] Para el primer tramo, por definición, es obvio que x siempre va a ser más pequeño que $a/2$ por lo que cambiamos el signo ya de antemano.

[94] Esos senos no son siempre cero. Están multiplicados por un entero, n, cierto, pero también por x que no tiene por qué adoptar valores enteros.

Tan solo habría que ir sustituyendo el parámetro n e ir haciendo las integrales. Es sólo calcular. No tengo muchas ganas de calcular ahora... digamos que se queda ahí para otro día de paseo por el parque con Frodo y a echar el rato.

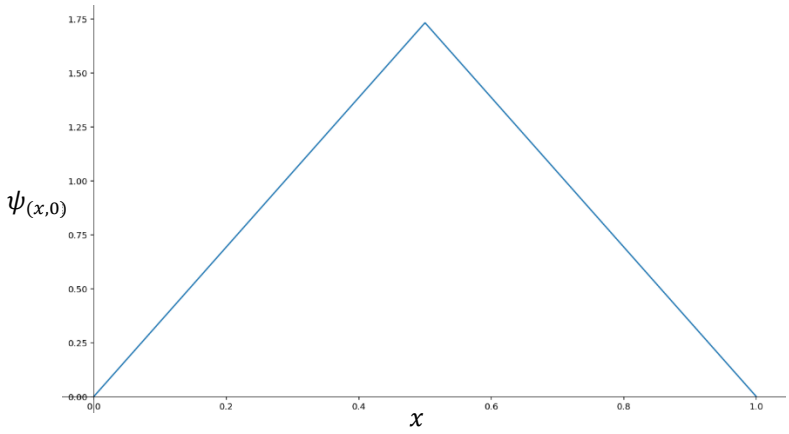
Lo importante es considerar que encontrando esa C_n ya podríamos expresar la suma de estados estacionarios incorporando la dimensión temporal pues ya la habríamos inducido en aquella considerando las condiciones iniciales tal y como hemos hecho.

Podemos introducir estas expresiones en Wolfram Mathematica o SageMath para resolverlas en un par de minutos. De hecho, en SageMath[95], que es totalmente gratuito y de código libre, podemos realizar simulaciones que permiten visualizar la función de onda de una manera hasta casi, casi, con cierto interés estético. He aquí cómo lo hemos hecho en SageMath online.[96]

```
a = 1;
hbar = 1;
m = 1;
n = var('n');
x = var('x');
t = var('t');


En(n) = ((n**2) * (pi**2) * (hbar**2)) / (2 * m * a**2)


psi(x, t, n) = sqrt(2 / a) * sin((n * pi * x) / a) * exp(-1j * En(n) * t / hbar)


psiStar(x, t, n) = sqrt(2 / a) * sin((n * pi * x) / a) * exp(1j * En(n) * t / hbar)


g(x) = sqrt(3 / a) * (1 - abs((x - (a / 2)) / (a / 2)))

plot(g(x), (x, 0, a), figsize=[5, 4])
```

[95] https://github.com/sagemath/sage-windows/releases

[96] https://sagecell.sagemath.org/



Este gráfico hace referencia a la función $\psi_{(x,0)}$ de las condiciones iniciales y su evolución con el cambio de x desde $x = 0$ hasta $x = a = 1$ y para un $t = 0$.

Si seguimos evaluando tenemos que C_n (obviamos la parte negativa e igual a cero):

```
21
22 Cn(n) = integral(psiStar(x, 0, n) * g(x), (x, 0, a))
23
24 Cn(n)
25
```

Evaluate

```
2*sqrt(6)*sin(1/2*pi*n)/(pi^2*n^2) - 2*(sqrt(6)*sin(pi*n) - sqrt(6)*sin(1/2*pi*n))/(pi^2*n^2)
```

Y la evolución de C_n según cambia n[97]:

```
22 Cn(n) = integral(psiStar(x, 0, n) * g(x), (x, 0, a))
23
24 #Cn(n)
25
26 [Cn(n) for n in range (1,10)]
27
28
29
```

Evaluate

```
[4*sqrt(6)/pi^2,
 0,
 -4/9*sqrt(6)/pi^2,
 0,
 4/25*sqrt(6)/pi^2,
 0,
 -4/49*sqrt(6)/pi^2,
 0,
 4/81*sqrt(6)/pi^2]
```

[97] Vemos que para todos los valores pares de n entre 1 y 10 que hemos considerado, obtenemos valores iguales a cero.

Trunquemos, ahora, el sumatorio de soluciones en $n = 3$. Es decir, como sabemos que nuestra solución global es una suma (ponderada por C_n a cada ciclo de n) de estados estacionarios en los que hemos considerado las condiciones iniciales *inyectádolas* en C_n para conocer la evolución en el tiempo, podemos expresar que nuestra función de onda como:

$$\psi_{(x,t)} = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_{n(x,t)}$$

Y, como decimos, truncando en $n = 3$, tenemos que:

$$\psi_{(x,t)} = C_1\psi_{1(x,t)} + C_2\psi_{2(x,t)} + C_3\psi_{3(x,t)}$$

$$\psi_{(x,t)} = \frac{4\sqrt{6}}{1^2 \cdot \pi^2} \cdot \psi_{1(x,t)} + 0 \cdot \psi_{2(x,t)} - \frac{4\sqrt{6}}{3^2 \cdot \pi^2}\psi_{3(x,t)}$$

Y ahora, si quisiéramos calcular el valor de la posición media cuadrada de la onda/partícula, es decir, $\langle x^2 \rangle$ en esos niveles de energía comprendidos en $n = [1,3]$, tendríamos que recurrir a algo que ya hemos visto:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{(x,t)} \cdot x^2 \cdot \psi_{(x,t)} dx$$

Es decir, otro follón bueno, fácil de ver, pero horrible de calcular[98]:

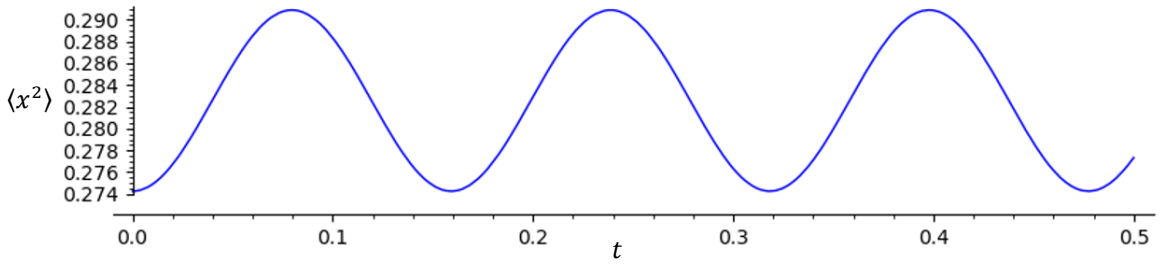
$$\langle x^2\rangle = \int_0^a \frac{\frac{4\sqrt{6}}{1^2\cdot\pi^2}\sqrt{2/a}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\cdot e^{i\frac{1^2\pi^2\hbar^2 t}{2ma^2\hbar}} - \frac{4\sqrt{6}}{3^2\cdot\pi^2}\sqrt{2/a}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\cdot e^{i\frac{1^2\pi^2\hbar^2 t}{2ma^2\hbar}}}{\frac{4\sqrt{6}}{1^2\cdot\pi^2}\sqrt{2/a}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\cdot e^{-i\frac{1^2\pi^2\hbar^2 t}{2ma^2\hbar}} - \frac{4\sqrt{6}}{3^2\cdot\pi^2}\sqrt{2/a}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\cdot e^{-i\frac{1^2\pi^2\hbar^2 t}{2ma^2\hbar}}} \cdot x^2 \cdot dx$$

Veamos de nuevo en SageMath, qué pinta tiene todo esto (cualquiera se pone a pulso…), es decir, la varianza de la posición: $\langle x^2\rangle$.

Obtenemos un valor oscilante que evoluciona con el tiempo:

```
#[Cn(n) for n in range (1,10)]

suma_truncada(x,t) = Cn(1)*psiStar(x, t, 1) + Cn(3)*psiStar(x, t, 3)
#suma_truncada(x,t)

valor_esperado(t) = integral(conjugate(suma_truncada(x,t))*x**2*suma_truncada(x,t),(x, 0, a))
#valor_esperado(t)

plot(valor_esperado(t), (0, 0.5), figsize=[8, 2])
```

Evaluate



Estando el tiempo en el eje horizontal y el valor estimado de x^2 en el vertical. Vemos que el valor medio de x^2 oscila (es importante fijarse en que nunca es igual a cero) en un rango de valores determinados.

Recordemos que definíamos la varianza como:

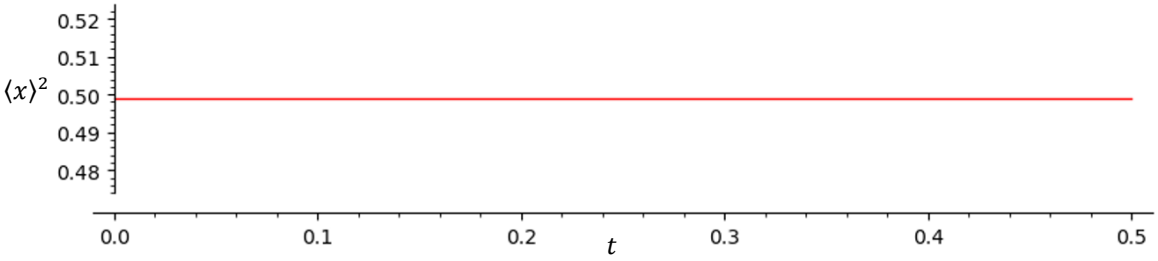
$$\sigma^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$$

[98] Importante, la parte temporal ya debe incorporarse… y cuidado con los conjugados.

Conocemos el valor de $\langle x^2 \rangle$. Si calculamos el de $\langle x \rangle$:

```
suma_truncada(x,t) = Cn(1)*psiStar(x, t, 1) + Cn(3)*psiStar(x, t, 3)
suma_truncada(x,t)

valor_esperado(t) = integral(conjugate(suma_truncada(x,t))*x*suma_truncada(x,t),(x, 0, a))
valor_esperado(t)
plot(valor_esperado(t), (0, 0.5), figsize=[8, 2], color='red')

```

Evaluate



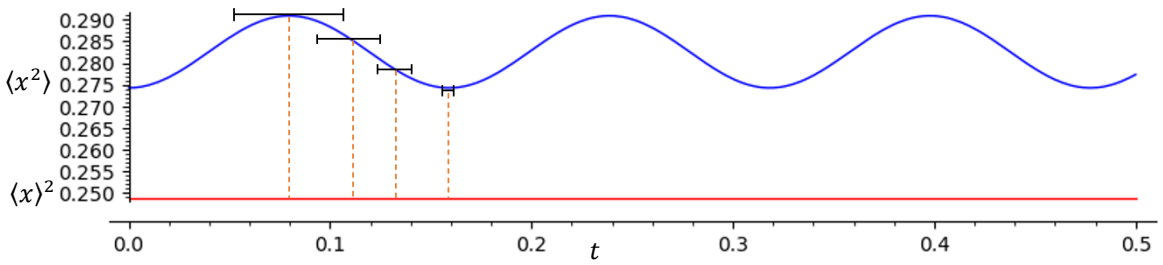
Elevamos al cuadrado:

$$\langle x \rangle^2 = 0.25$$

Y, según nuestra propia definición, la varianza sería la distancia cuadrada esperada entre estos dos valores:

```
valor_esperado(t) = integral(conjugate(suma_truncada(x,t))*x**2*suma_truncada(x,t),(x, 0, a))
valor_esperado(t)
valor_esperadox(t) = integral(conjugate(suma_truncada(x,t))*x*suma_truncada(x,t),(x, 0, a))
valor_esperadoxx(t) = valor_esperadox(t)^2

p1 = plot(valor_esperado(t), (0, 0.5), figsize=[8, 2], color='blue')
p2 = plot(valor_esperadoxx(t), (0, 0.5), figsize=[8, 2], color='red')
p1+p2

#f(x) = Cn(1)*psi(x,0,1) + Cn(3)*psi(x,0,3) + Cn(5)*psi(x,0,5) + Cn(7)*psi(x,0,7) + Cn(20)*psi(x,0,20)
#def fn(x,t,nappr):
```

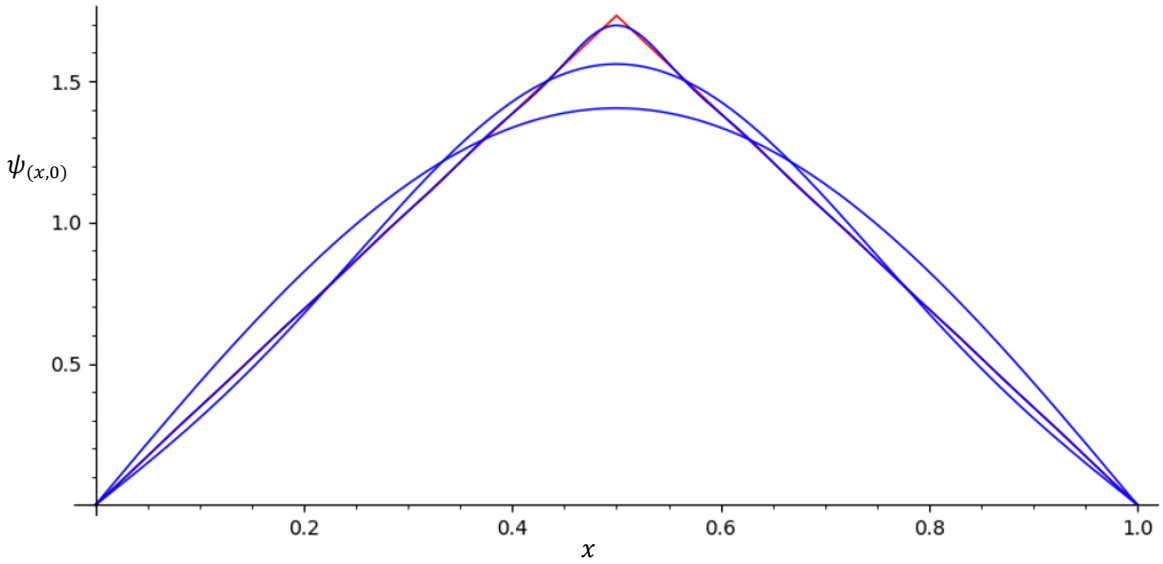
Evaluate



Por otro lado, si queremos ver cuánto se ajusta nuestra función (o mejor, suma de funciones) a las condiciones iniciales, veremos que a más iteraciones, más aproximación. Probemos hasta $n = 2, n = 4$ y $n = 20$ (en azul) y comparémoslo con las condiciones inciales (en rojo).

```
35
36 #f(x) = Cn(1)*psi(x,0,1) + Cn(3)*psi(x,0,3) + Cn(5)*psi(x,0,5) + Cn(7)*psi(x,0,7) + Cn(20)*psi(x,0,20)
37
38 def fn(x,t,nappr):
39     return sum([Cn(nn)*psi(x,t,nn) for nn in range(1,nappr)])
40
41 p1 = plot(g(x),x,0,a,figsize=[8,4],color='red');
42 p2 = plot(fn(x,0,2),x,0,a,figsize=[8,4],color='blue');
43 p3 = plot(fn(x,0,4),x,0,a,figsize=[8,4],color='blue');
44 p4 = plot(fn(x,0,20),x,0,a,figsize=[8,4],color='blue');
```

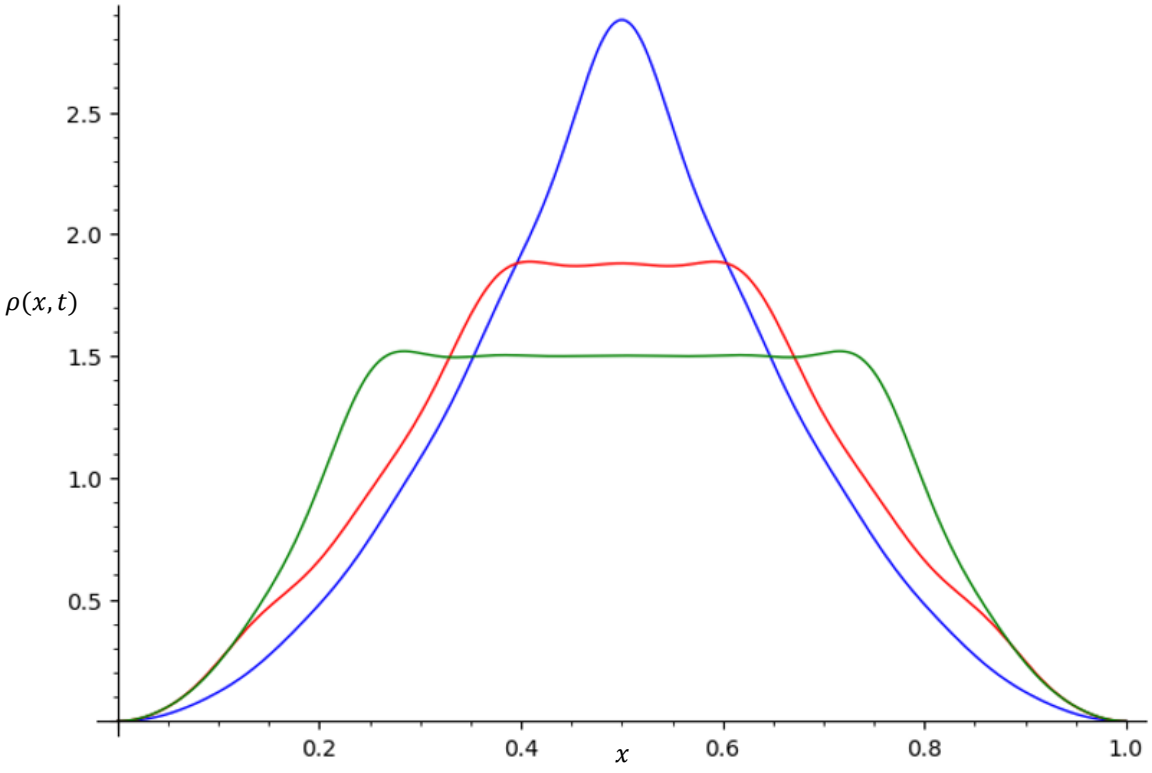
Evaluate



Y, finalmente, veamos cómo cambia la probabilidad de colapso de la partícula en x según evoluciona el tiempo:

```
48 def fn(x,t,nappr):
49     return sum([Cn(nn)*psi(x,t,nn) for nn in range(1,nappr)])
50 def ro(x,t):
51     return (abs(fn(x,t,20))^2)
52 p1 = plot(lambda x:ro(x,0),0,a, figsize=[7,5],color='blue')
53 p2 = plot(lambda x:ro(x,0.04),0,a, figsize=[7,5],color='red')
54 p3 = plot(lambda x:ro(x,0.08),0,a, figsize=[7,5],color='green')
55 #p4 = plot(lambda x:ro(x,0.12),0,a, figsize=[7,5],color='blue')
56 #p5 = plot(lambda x:ro(x,0.16),0,a, figsize=[7,5],color='blue')
57 p1+p2+p3
```

Evaluate



Obsérvese que la mayor incertidumbre corresponde a t~0.08*, la curva verde. Esto tiene perfecta correspondencia con lo que reflejaba nuestra función cosenoide.*

Es decir que la probabilidad $\rho(x,t)$ de colapso de la partícula oscila de *arriba* a *abajo*, de poca incertidumbre (campana de Gauss afilada/azul) a mucha incertidumbre (meseta baja/verde), y viceversa (de *abajo* a *arriba*) al ritmo que marca la cosenosoide de la varianza.

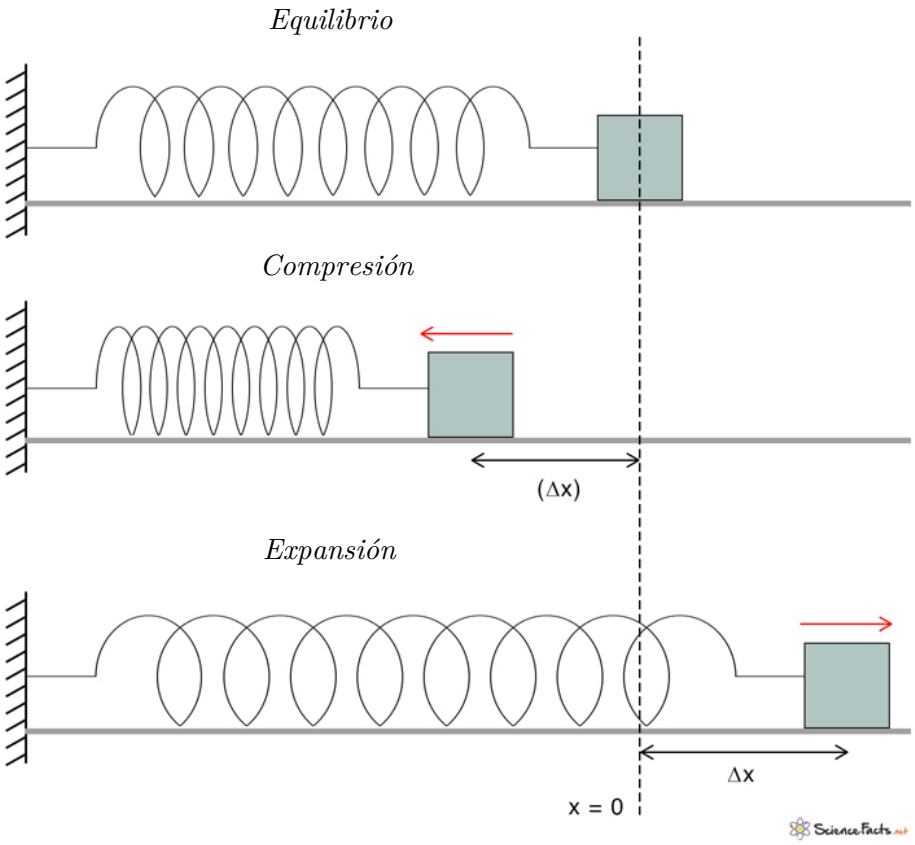
Adjunto el código de SageMath:

```
a = 1;
hbar = 1;
m = 1;
n = var('n');
x = var('x');
t = var('t');

En(n) = ((n**2) * (pi**2) * (hbar**2)) / (2 * m * a**2)
psi(x, t, n) = sqrt(2 / a) * sin((n * pi * x) / a) * exp(-1j * En(n) * t / hbar)
psiStar(x, t, n) = sqrt(2 / a) * sin((n * pi * x) / a) * exp(1j * En(n) * t / hbar)
g(x) = sqrt(3 / a) * (1 - abs((x - (a / 2)) / (a / 2)))
#plot(g(x), (x, 0, a), figsize=[5, 4])

Cn(n) = integral(psiStar(x, 0, n) * g(x), (x, 0, a))
#Cn(n)
#[Cn(n) for n in range (1,10)]
#suma_truncada(x,t) = Cn(1)*psiStar(x, t, 1) + Cn(3)*psiStar(x, t, 3)
#suma_truncada(x,t)

#valor_esperado(t) = integral(conjugate(suma_truncada(x,t))*x**2*suma_truncada(x,t),(x, 0,
a))
#valor_esperado(t)
#plot(valor_esperado(t), (0, 0.5), figsize=[8, 2])

#f(x) = Cn(1)*psi(x,0,1) + Cn(3)*psi(x,0,3) + Cn(5)*psi(x,0,5) + Cn(7)*psi(x,0,7) +
Cn(20)*psi(x,0,20)
#def fn(x,t,nappr):
 #    return sum([Cn(nn)*psi(x,t,nn) for nn in range(1,nappr)])

#p1 = plot(g(x),x,0,a,figsize=[8,4],color='red');
#p2 = plot(fn(x,0,2),x,0,a,figsize=[8,4],color='blue');
#p3 = plot(fn(x,0,4),x,0,a,figsize=[8,4],color='blue');
#p4 = plot(fn(x,0,20),x,0,a,figsize=[8,4],color='blue');
#p1+p2+p3+p4

def fn(x,t,nappr):
    return sum([Cn(nn)*psi(x,t,nn) for nn in range(1,nappr)])
def ro(x,t):
    return (abs(fn(x,t,20))^2)
p1 = plot(lambda x:ro(x,0),0,a, figsize=[7,5],color='blue')
p2 = plot(lambda x:ro(x,0.04),0,a, figsize=[7,5],color='red')
p3 = plot(lambda x:ro(x,0.08),0,a, figsize=[7,5],color='green')
#p4 = plot(lambda x:ro(x,0.12),0,a, figsize=[7,5],color='orange')
#p5 = plot(lambda x:ro(x,0.16),0,a, figsize=[7,5],color='blue')
p1+p2+p3
```

Nota: si tratamos de dibujar p4 y p5, la aplicación peta, por eso las dejo comentadas.

Oscilador armónico cuántico. Operadores de escalera.

Abordemos ahora un escenario con potencial de Oscilador armónico. Hagamos una primera aproximación conceptual. Para ello recordemos cómo definimos el potencial en un muelle:



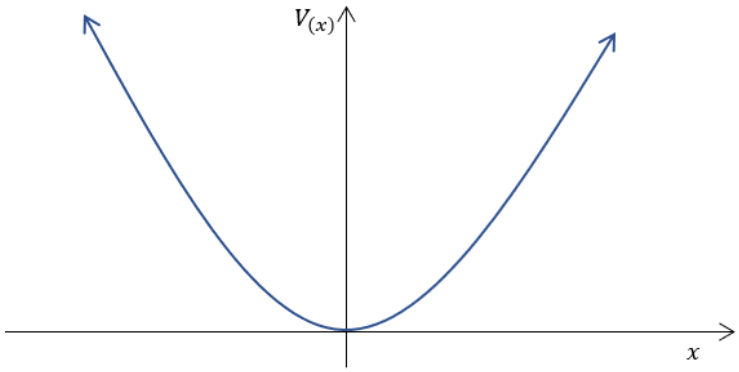
$$V_{(x)} = \frac{1}{2}kx^2$$

Donde k es la constante de compresión del muelle. Sabiendo que:

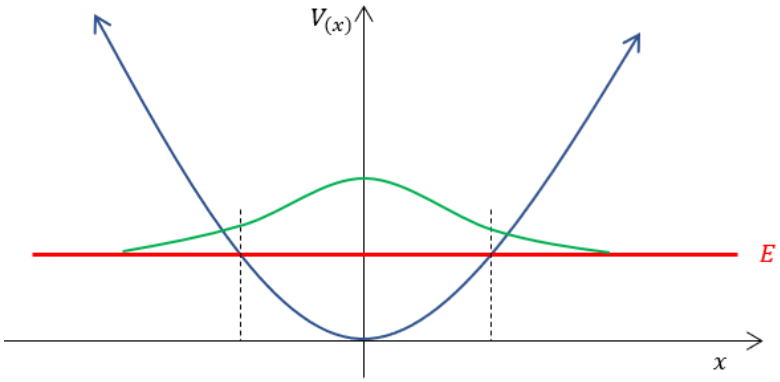
$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Podemos expresar el potencial como:

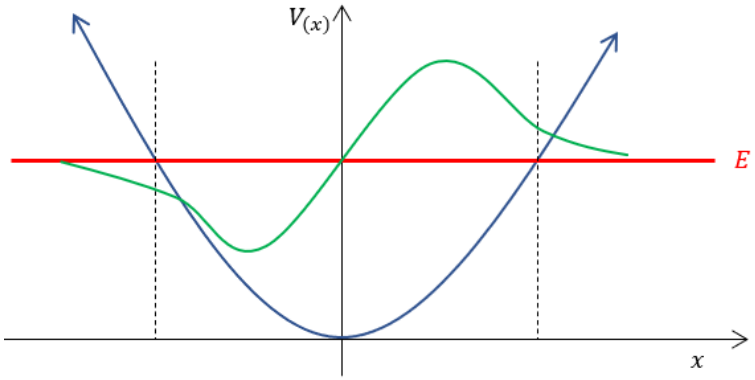
$$V_{(x)} = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$



En este tipo de escenarios, para funciones que en $x = 0$ están por encima de niveles de energía $= E$, encontraremos soluciones que responden a este patrón:



Si en cambio, nuestra función pasa justo, en $x = 0$ por la recta constante de energía, encontraríamos soluciones que se parecerían más a esto otro:



Retomemos ahora nuestra Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V_{(x)}\psi = E\psi$$

Sustituyamos por el potencial del oscilador armónico:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi$$

Esto, lo sabemos, se puede expresar como:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Ahora analicemos con más detalle el operador Hamiltoniano y juguemos con él[61].

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$\widehat{H} = -\frac{1}{2m}\hat{p}^{\,2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$\widehat{H} = -\frac{1}{2m}\hat{p}^{\,2} + \frac{1}{2}\frac{m}{m}m\omega^2 x^2$$

$$\widehat{H} = -\frac{1}{2m}(\hat{p}^{\,2} + (m\omega x)^2)$$

Fijémonos en la parte resaltada en color verde. Una suma de cuadrados que, si los operadores se comportaran siempre como números, podríamos descomponer así:

$$a^2 + b^2 = (a + ib)(a - ib)$$

Esto nos da pistas[62]. Vamos a dejarnos guiar un poco por lo que la intuición nos puede sugerir. ¿Sería posible, forzando un poco el escenario imaginar que estamos ante un operador parecido a esto[63]?

$$\pm\hat{p}^{\,2} + (m\omega\hat{x})^2$$

[61] No echamos mucha cuenta al signo negativo del operador ya que estamos haciendo un análisis poco riguroso, a vuela pluma, del aspecto que tienen las cosas, a ver si sacamos alguna pista por intuición.

[62] Ojo, naturalmente un operador no es un número. No tienen por qué tener el mismo comportamiento. Un operador es una especie de función de funciones, no un número. Esto es, recordemos: una función es una *caja* en la que entra un número y sale otro número tras ser sometido a la transformación propia que haga la función. En el caso de un operador, estamos ante una *caja* que recibe como input una función y arroja como output otra función transformada.

[63] Sí, forzando la intuición, hemos convertido la x en un operador.

Esto, que hemos forzado por el momento (más adelante seremos menos toscos), se parece a lo que llamamos operador de escalera[64]. Podemos expresarlo, de manera general, así:

$$\hat{a}_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\pm i\hat{p} + m\omega\hat{x})$$

Si nos fijamos en nuestra definición, resulta que el despliegue de este producto es el Operador hamiltoniano. Veamos[65]:

$$\hat{a}_{-} \cdot \hat{a}_{+} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\hat{p} + m\omega\hat{x})(-i\hat{p} + m\omega\hat{x})$$

$$\hat{a}_{-} \cdot \hat{a}_{+} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-i^2\hat{p}^2 + m^2\omega^2\hat{x}^2 - m\omega\hat{x}i\hat{p} + i\hat{p}m\omega\hat{x})$$

$$\hat{a}_{-} \cdot \hat{a}_{+} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}[\hat{p}^2 + m^2\omega^2\hat{x}^2 - im\omega(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})]$$

De donde podemos decir que la parte marcada en color azul, resulta que se parece mucho al Hamiltoniano para un Oscilador armónico, que no es otro que[66]:

---

[64] *Ladder operator.*

[65] $\hat{x}$ y $\hat{p}$, son operadores. No son números, el orden del producto sí importa, por eso no se pueden ir: $i\hat{p}m\omega\hat{x} - m\omega\hat{x}i\hat{p}$. Por otro lado, por coherencia con el libro que seguimos, hemos optado por dejar la diferencia entre operadores como $(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})$ cuando, en propiedad, debería ser $(\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p})$. No importa nada. Como veremos a continuación, se trata de un conmutador y para éstos se cumple que:

$$[A, B] = AB - BA \rightarrow -[A, B] = [B, A]$$

[66] Recordemos que definíamos el Operador hamiltoniano, que en física cuántica podemos llegar a decir que es la suma de energía potencial y cinética, como $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 ALGO}{\partial x^2} + E_{P(x)}ALGO$.
Hagamos una síntesis somera. Sabemos que, por el principio de conservación de la energía, En mecánica clásica $E_{Total} = E_C + E_P$. De hecho, en Mecánica clásica, para el caso de un oscilador armónico, toma la forma de:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

De hecho, nuestra expresión:

$$\hat{a}_- \cdot \hat{a}_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega}[\hat{p}^2 + m^2\omega^2\hat{x}^2 - im\omega(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})]$$

$$\hat{a}_- \cdot \hat{a}_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega}\hat{p}^2 + m^2\omega^2\hat{x}^2 - \frac{1}{2\hbar m\omega}im\omega(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})$$

$$E_T = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2$$

Donde k es una constante relacionada con la *dureza* del muelle.
En Mecánica cuántica, en cambio, desde la propia Ecuación de Schrödinger llegamos a expresar la conservación de la energía como:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

Y ya sabemos que:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Y al hacer la transición de este principio a la ecuación de Schrödinger, las variables físicas adoptan la forma de operadores. Aprovechamos también para desplegar a constante k ligada a la tensión del *muelle* que queda definida como:

$$E = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

Ya que:

p, pasa a convertirse en operador$\rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$, y x, también $\rightarrow \hat{x}$.

Al derivar dos veces, $\hat{H}$, entonces queda como:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2$$

Las energía cinética y potencial se han transformado en el Hamiltoniano que actúa sobre la función de onda, para generar la evolución de la función de onda en el tiempo y en el espacio. La Ecuación de Schrödinger da las energías cuantizadas del sistema, y da la forma de la función de onda, de manera que, desde ese escenario, se pueden calcular otras propiedades del sistema.

Queda como[67]:

$$\hat{a}_- \cdot \hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2\hbar m\omega} im\omega(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\,\hat{x})$$

Pero, ¿qué es la parte que aún queda marcada en rojo? Un conmutador:

$$[\hat{x}, \hat{p}] \equiv (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})$$

Aunque ya debemos saber lo que es un conmutador[68], es útil recordar que esta expresión que hemos recogido arriba no es otra cosa que un *comprobador de conmutación*. ¿Para qué nos sirve comprobar una conmutación? Muy simple: sabemos que un operador no siempre funciona como un número. Si los operadores propuestos arriba se comportaran justamente como un número, la diferencia entre los productos conmutados debería ser igual a cero. En cambio, si es diferente de cero, quiere decir que no conmutan, es decir, que aplicar primero uno y después otro a, por ejemplo, una función de onda, produce resultados diferentes. Los conmutadores nos permiten ver qué

[67] Para que nuestra expresión sea justamente el Hamiltoniano, habría que añadirle, a éste, la parte que hemos marcado en color rojo:

$$\frac{1^2}{2\hbar m\omega}(\hat{p}^2 + m^2\omega^2\hat{x}^2) \rightarrow \frac{1}{\hbar\omega}\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \rightarrow \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H}$$

No hemos conseguido factorizar enteramente el Hamiltoniano. Nos ha quedado ahí un pequeño residuo.

[68] Véase "*Apuntes de filosofía. Relatividad General*". Iohannes Svlis.

grado de conmutación se produce: cero si es total, diferente de cero si no conmuta.

Veamos, precisamente, como afecta esto a una función de onda ψ[69]:

$$[\hat{x},\hat{p}]\psi = (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\psi = \hat{x}\hat{p}\psi - \hat{p}\hat{x}\psi$$

Despleguemos los operadores:

$$\hat{x}(\hat{p}\psi) - \hat{p}(\hat{x}\psi) = x\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\right)$$

Sigamos desplegando. Para ello tengamos en consideración que lo marcado en rojo es la derivada de un producto:

$$\hat{x}(\hat{p}\psi) - \hat{p}(\hat{x}\psi) = x\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) - \left(-i\hbar\left(\frac{\partial x}{\partial x}\psi + x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right)$$

$$\hat{x}(\hat{p}\psi) - \hat{p}(\hat{x}\psi) = x\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) - \left(-i\hbar\left(1.\psi + x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right)$$

$$\hat{x}(\hat{p}\psi) - \hat{p}(\hat{x}\psi) = x\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) - \left(-i\hbar\psi - i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

$$\hat{x}(\hat{p}\psi) - \hat{p}(\hat{x}\psi) = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\psi + i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$\hat{x}(\hat{p}\psi) - \hat{p}(\hat{x}\psi) = i\hbar\psi$$

$$[\hat{x},\hat{p}]\psi = i\hbar\psi$$

[69] En la parte izquierda, a la función de onda ψ, se le aplica primero $\hat{p}$ y después $\hat{x}$, mientras que en la parte derecha sucede justo lo contrario.

Es decir, que el grado de *no-conmutación* que se produce es la siguiente constante:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Si ahora retomamos toda nuestra expresión en la que aplicábamos los operadores de escalera, es decir:

$$\hat{a}_- \cdot \hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2\hbar m\omega} im\omega(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\,\hat{x})$$

Sustituyendo con la conmutación:

$$\hat{a}_- \cdot \hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2\hbar m\omega} im\omega(i\hbar)$$

$$\hat{a}_- \cdot \hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{i^2 m\omega\hbar}{2\hbar m\omega}$$

$$\hat{a}_- \cdot \hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} + \frac{m\omega\hbar}{2\hbar m\omega}$$

$$\hat{a}_- \cdot \hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} + \frac{1}{2}$$

E, invirtiendo el orden de los operadores, tendríamos

$$\hat{a}_+ \cdot \hat{a}_- = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2}$$

Podemos, entonces, expresar el Hamiltoniano, tras este proceso de factorización, en función de los operadores de escalera y las constantes que hemos obtenido[70].

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + {}^1/_2)$$
$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_-\hat{a}_+ - {}^1/_2)$$

Pero, ¿para qué hemos hecho todo esto?¿Para obtener sólo una expresión diferente? Por supuesto que no. Realmente, con esto, nos hemos ahorrado muchísimo trabajo. Ahora viene la magia. De verdad que merece la pena.

Recordemos nuestra Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Usemos nuestra expresión del Hamiltoniano en función de los operadores escalera:

$$\hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + {}^1/_2)\psi = E\psi$$

Y ahora, la idea que lo cambia todo. Imaginemos que, en vez de ser el Hamiltoniano el único operador que actúa sobre ψ, hay, previamente, un operador escalera ya afectando a la función de onda, es decir: $\hat{H}(\hat{a}_+\psi)$. Analicemos el término de la izquierda. Pasaríamos a tener:

[70] Claro que cambia el signo del ${}^1/_2$ asociado al $\hat{a}_+\hat{a}_-$ o al $\hat{a}_-\hat{a}_+$. Hemos despejado $\hat{H}$ y las constantes se han ido al otro lado con el signo cambiado.

$$\hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + {}^1/_2)\hat{a}_+\psi$$
$$= \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+ + \hat{a}_+ {}^1/_2)\psi$$
$$= \hbar\omega\hat{a}_+(\hat{a}_-\hat{a}_+ + {}^1/_2)\psi$$

¡Por qué poco no tenemos de nuevo el Hamiltoniano en lo que hemos marcado en color azul! Pero, un momento, estamos a sólo un paso, a cambiar un poco el término constante (1/2) para obtenerlo… Hagámoslo así, pues en definitiva, son constantes (estaríamos un poco más arriba o abajo en la escala de energía, pero las relaciones seguirían siendo las establecidas en nuestros operadores y funciones):

$$= \hbar\omega\hat{a}_+(\hat{a}_-\hat{a}_+ - {}^1/_2 + 1)\psi$$

Ahora sí, ahora lo marcado en color azul conforma el Hamiltoniano tal y como lo tenemos descrito un poco más arriba. Introduzcamos $\hbar\omega$ en los operadores. Ahora podemos reescribir como:

$$= \hat{a}_+(\hbar\omega(\hat{a}_-\hat{a}_+ - {}^1/_2) + \hbar\omega \cdot 1)\psi$$
$$= \hat{a}_+(\hat{H} + \hbar\omega)\psi$$

Y ojo a esto que es muy importante. Como sabemos que:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Podemos decir que:

$$\hat{a}_+\left(\hat{H} + \hbar\omega\right)\psi = \hat{a}_+(E + \hbar\omega)\psi$$

Como el elemento $(E + \hbar\omega)$ es totalmente constante, lo podemos mover antes del operador de escalera:

$$= (E + \hbar\omega)\hat{a}_+\psi$$

Y si ahora reescribo la expresión entera:

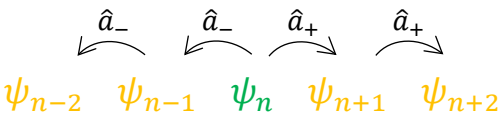
$$\hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + {}^1/_2\right)\hat{a}_+\psi = (E + \hbar\omega)\hat{a}_+\psi$$
$$\hat{H}(\hat{a}_+\psi) = (E + \hbar\omega)(\hat{a}_+\psi)$$

Que, podemos observar, se parece mucho a la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$
$$\hat{H}(\hat{a}_+\psi) = (E + \hbar\omega)(\hat{a}_+\psi)$$

Esto quiere decir que si ψ es una solución para la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, entonces $\hat{a}_+\psi$ lo es también para un estado de energía superior a E: $(E + \hbar\omega)$ (igualmente para $\hat{a}_+\psi$ y E: $(E - \hbar\omega)$. Esto es un resultado muy poderoso. Esto es lo que nos aportan los operadores de escalera: habiendo encontrado una solución, podemos subir y bajar niveles de energía mediante los

operadores de escalera y encontrar soluciones adicionales. Encontrando una, las encontraremos todas. Habiendo encontrado la solución ψ_n, podríamos proceder así:



¿Podemos bajar la escalera hasta el infinito? No, naturalmente, ni subirla. Podremos subirla tanto como arbitrariamente queramos, dentro de los límites de la realidad física pero, la bajada está más constreñida. En concreto hasta un nivel de energía igual a cero (o, al menos, por debajo del potencial establecido para el oscilador armónico). Ése sería, por decirlo de alguna manera, el primer escalón, o el escalón más bajo, de nuestra escalera de búsqueda de nuevas soluciones. Podríamos definirlo, con dicha constricción, así:

$$\hat{a}_-\psi_0 = 0$$

Desarrollémoslo. Recordemos:

$$\hat{a}_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\pm i\hat{p} + m\omega\hat{x})$$

Entonces:

$$\hat{a}_-\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-i i\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_0 = 0$$

$$\hat{a}_{-}\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_0 = 0$$

Podemos resolver esta Ecuación diferencial muy fácilmente. Primero saquemos los elementos constantes (en azul) y centrémonos sólo en la parte propiamente diferencial pues, si esa parte es igual a cero, todo es igual a cero (ya que la parte constante, de hecho, no es igual a cero):

$$\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_0 = 0$$

$$\hbar\frac{d\psi_0}{dx} + m\omega x\psi_0 = 0$$

$$\hbar\frac{d\psi_0}{dx} = -m\omega x\psi_0$$

$$\hbar d\psi_0 = -m\omega x\psi_0 dx$$

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}xdx$$

$$\int\frac{1}{\psi_0}d\psi_0 = \int -\frac{m\omega}{\hbar}xdx$$

$$\ln\psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2$$

Despejamos el logaritmo exponenciando, y obtenemos nuestra solución de energía más baja. Nuestro primer escalón:

$$\psi_0 = Ae^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}$$

Esto hay que normalizarlo, hallar A. Recordemos que para ello:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{(x)} \psi_{(x)}\, dx = 1$$

Calculémosla (fijémonos que no tiene parte imaginaria por lo que realmente el conjugado no cambia):

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)} e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}\, dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\left(-\frac{2m\omega}{2\hbar}x^2\right)}\, dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)}\, dx = 1$$

Con SageMath obtenemos que la constante es (en azul)[71]:

[71] Esta integral es una integral impropia y, por ello, un poco peculiar. De hecho no tiene solución en el plano cartesiano por lo que vamos a tener que hacer un cambio de coordenadas a coordenadas polares para poder resolverla. Más allá de eso no presenta mayores problemas. Usamos el siguiente procedimiento.

Podemos presentar el cuadrado del área subsumida por la función como el producto entre dos integrales de variables diferentes:

$$I_x = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)}\, dx$$

$$I_y = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}y^2\right)}\, dy$$

$$I_x \cdot I_y = I^2 = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}(x^2+y^2)\right)}\, dx\, dy$$

Podemos convertir $(x^2 + y^2)$ a un radio en coordenadas polares:

$$r^2 = x^2 + y^2$$

Y sabemos que el diferencial en coordenadas polares se transforma del siguiente modo:

$$dxdy = rdrd\theta$$

Tenemos entonces:

$$I^2 = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} e^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}r^2\right)} r\, dr\, d\theta$$

La primera integral, la referente a θ, es muy simple:

$$\int_0^{2\pi} d\theta \rightarrow \left[\theta\right]_0^{2\pi} \rightarrow 2\pi$$

Como 2π es constante respecto a r, lo podemos sacar de su integrando:

$$I^2 = 2\pi \int_0^{\infty} re^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}r^2\right)} dr$$

Ahora traigamos una regla Deus ex machina que, de todas formas, es bastante obvia. Sabemos que:

$$\int f'_{(x)}\, e^{f(x)} dx = e^{f(x)}$$

Siendo esto así, acerquemos nuestra expresión a esta norma, pues es factible y fácil. Para acometerlo necesitamos que *abajo* , como $f'_{(x)}$, esté esto:

$$-\frac{m\omega 2r}{\hbar}$$

Como ya tenemos la r, lo podemos incluir, añadiendo su inversa fuera, claro, para anularlo:

$$I^2 = -\frac{2\pi\hbar}{2m\omega} \int_0^{\infty} -\frac{m\omega 2}{\hbar} re^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}r^2\right)} dr$$

$$I^2 = -\frac{\pi\hbar}{m\omega} \left[e^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}r^2\right)}\right]_0^{\infty}$$

Habría que evaluar el límite de lo marcado en azul:

$$\left[e^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}r^2\right)}\right]_0^{\infty} = \frac{1}{e^{\left(\frac{m\omega}{\hbar}\infty^2\right)}} - \frac{1}{e^{\left(\frac{m\omega}{\hbar}0^2\right)}} = 0 - 1 = -1$$

$$I^2 = -\frac{\pi\hbar}{m\omega}[-1] = \frac{\pi\hbar}{m\omega}$$

Y antes nos queda recordar que estamos resolviendo una igualdad:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)} dx = 1$$

Para que esto se cumpla, es necesario que se resuelva mediante:

$$x^2 = (algo) \rightarrow x = (algo)^{\frac{1}{2}}$$

Luego:

$$I^2 = \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} = 1 \rightarrow I^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \rightarrow I = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}$$

Que es nuestra primera solución escalón de la escalera[72]. Subamos un escalón y calculemos ψ_1. Para ello tendremos que hacer:

[72] Realmente en estas soluciones hay que inducir una componente más de normalización que es proporcional al nivel de energía, al escalón, en que estemos. Para ψ_0 no ha hecho falta porque resulta que es 1, pero para el resto de casos es necesaria. Fijémonos:

$\hat{a}_+\psi_n$ es proporcional a ψ_{n+1}
$\hat{a}_-\psi_n$ es proporcional a ψ_{n-1}

¿Cuál es exactamente esa proporción? Podemos calcularla mediante el siguiente procedimiento. Tendremos que recurrir a estas expresiones.

$$\hat{a}_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\pm i\hat{p} + m\omega\hat{x})$$

$$\hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - {}^1/_2\right)\psi = E\psi \rightarrow \hat{a}_-\hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} + \frac{1}{2}$$

$$\hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + {}^1/_2\right)\psi = E\psi \rightarrow \hat{a}_+\hat{a}_- = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2}$$

Ahora, de la expresión que hemos obtenido para ψ_0 podemos generalizar lo siguiente:

$$\psi_n = A_n(\hat{a}_+)^n\psi_0 \rightarrow \begin{cases}\hat{a}_+\psi_n = C_n\psi_{n+1}\\ \hat{a}_-\psi_n = D_n\psi_{n-1}\end{cases}$$

Considerando que si $f_{(x)}$ y $g_{(x)}$ son funciones que tienden a cero en el infinito, es decir, son normalizables, entonces se puede probar que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*_{(x)}\left(a_\pm g_{(x)}\right)dx = \int_{-\infty}^{\infty}\left(a_\mp f_{(x)}\right)^* g_{(x)}\,dx$$

Entonces, podemos proceder así:

$$\hat{a}_+\psi_n = C_n\psi_{n+1} \quad \text{y} \quad \hat{a}_-\psi_n = C_n\psi_{n-1}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}(a_+\psi_n)^*(a_+\psi_n)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}(a_-a_+\psi_n)^*\psi_n\,dx = |C_n|^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n{}^*\psi_n\,dx = |C_n|^2\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_{n+1}|^2\,dx$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}(a_-\psi_n)^*(a_-\psi_n)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}(a_+a_-\psi_n)^*\psi_n\,dx = |C_n|^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n{}^*\psi_n\,dx = |C_n|^2\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_{n-1}|^2\,dx$$

De lo que sabemos que, al ser funciones normalizables, lo marcado en color rojo es = 1, por lo que:

$$\int_{-\infty}^{\infty}(a_-a_+\psi_n)^*\psi_n\,dx = |C_n|^2$$
$$\int_{-\infty}^{\infty}(a_+a_-\psi_n)^*\psi_n\,dx = |D_n|^2$$

Y como sabemos que:

$$\hbar\omega\left(\hat{a}_\mp\hat{a}_\pm \mp {}^1/_2\right)\psi_n = E_n\psi_n$$

Y también que:

$$E_n\psi_n = \hbar\omega\left(n + {}^1/_2\right)\psi_n$$

Entonces:

$$\hbar\omega\left(\hat{a}_\mp\hat{a}_\pm \mp {}^1/_2\right)\psi_n = \hbar\omega\left(n + {}^1/_2\right)\psi_n$$

De donde despejamos que:

$$\hat{a}_-\hat{a}_+\psi_n = (n+1)\psi_n$$

$$\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n = n\psi_n$$

Entonces podemos decir:

$$\int_{-\infty}^{\infty}(a_-a_+\psi_n)^*\psi_n\,dx = |C_n|^2 \to (n+1)\int_{-\infty}^{\infty}{\psi_n}^*\psi_n\,dx \to (n+1)\cdot 1 \to C_n = \sqrt{n+1}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty}(a_+a_-\psi_n)^*\psi_n\,dx = |D_n|^2 \to (n)\int_{-\infty}^{\infty}{\psi_n}^*\psi_n\,dx \to (n)\cdot 1 \to D_n = \sqrt{n}$$

Y como sabíamos que:

$$\psi_n = A_n(\hat{a}_+)^n\psi_0 \to \begin{cases}\hat{a}_+\psi_n = C_n\psi_{n+1}\\ \hat{a}_-\psi_n = D_n\psi_{n-1}\end{cases}$$

Podemos llegar a:

$$\hat{a}_+\psi_n = C_n\psi_{n+1} \to \hat{a}_+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1} \to \psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{a}_+\psi_n$$
$$\hat{a}_-\psi_n = D_n\psi_{n-1} \to \hat{a}_-\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1} \to \psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}_-\psi_n$$

Y recogerlo en una fórmula de carácter general:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{0+1}}a_+\psi_0$$
$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{1+1}}a_+\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{1*2}}a_+^2\psi_0$$
$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2+1}}a_+\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{1*2*3}}a_+^3\psi_0$$
...

$$\psi_{n(x)} = \frac{1}{\sqrt{n!}}a_+^n\psi_{0(x)}$$

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{1!}} a_+^1 \psi_0 = 1 \cdot a_+ \cdot \psi_0$$

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}$$

$$\psi_1 = 1 \cdot \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-i\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right) + m\omega x\right) \cdot \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}$$

$$\psi_1 = \frac{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar\frac{de^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}}{dx} + m\omega x e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}\right)$$

$$\psi_1 = \frac{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}2x e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}\right) + m\omega x e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}\right)$$

$$\psi_1 = \frac{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(m\omega x e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)} + m\omega x e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}\right)$$

$$\psi_1 = \frac{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(2m\omega x e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}\right)$$

$$\psi_1 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}$$

Oscilador armónico cuántico II. Series de potencias.

Además de mediante los operadores de escalera, hay otros modos de resolver la Ecuación de Schrödinger para un Oscilador armónico cuántico como, por ejemplo, las Series de potencias.

Recordemos que tenemos que resolver, en este caso:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} + V_{(x)}\psi_{(x)} = E\psi_{(x)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{(x)}}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi_{(x)} = E\psi_{(x)}$$

Para avanzar en su resolución es interesante hacer un cambio de variable que facilite el proceso. Con tal fin renombremos[73] x:

$$x = \sqrt{\hbar/_{m\omega}}\,\xi$$

[73] ¿Por qué así? Ya lo veremos, pero facilita mucho las cosas.

Empecemos a sustituir[74]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\,\xi\right)}}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\,\xi\right)^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\,\xi\right)}=E\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\,\xi\right)}$$

Para sustituir el diferencial recurrimos a la regla de la cadena, en dos fases. Para no alargar demasiado la expresión, nos ceñimos a trabajar sólo con la parte marcada en color rojo:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial\xi}\frac{\partial\xi}{\partial x}\right)$$

La parte marcada en azul desaparece fácilmente ya que si:

$$x=\sqrt{\hbar/m\omega}\,\xi\rightarrow\xi=x\sqrt{m\omega/\hbar}$$

Que se deriva directamente:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial\xi}\sqrt{m\omega/\hbar}\right)$$

Que como es una constante, podemos sacarla del complejo diferencial:

[74] No podemos sustituir, así como así, el diferencial.

$$\sqrt{m\omega/\hbar}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial\xi}\right)$$

En la parte roja hay que volver a aplicar la regla de la cadena:

$$\sqrt{m\omega/\hbar}\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2}\frac{\partial\xi}{\partial x}$$

Conocemos la parte derecha:

$$\sqrt{m\omega/\hbar}\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2}\sqrt{m\omega/\hbar}$$

Que podemos volver a sacar del derivando:

$$\sqrt{m\omega/\hbar}\sqrt{m\omega/\hbar}\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2}\rightarrow\left(m\omega/\hbar\right)\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2}$$

Y ya hemos transformado el diferencial completamente. Ahora nuestra expresión completa nos queda como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(m\omega/\hbar\right)\frac{\partial^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}}{\partial\xi^2}+\frac{1}{2}m\omega^2\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\,\xi\right)^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}=E\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(m\omega/\hbar\right)\frac{\partial^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}}{\partial\xi^2}+\frac{1}{2}m\omega^2\left(\hbar/m\omega\right)\xi^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}=E\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}$$

$$-\frac{\hbar\omega}{2}\frac{\partial^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}}{\partial\xi^2}+\frac{\hbar\omega}{2}\xi^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}=E\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}$$

$$\frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{\partial^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}}{\partial\xi^2}+\xi^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}\right)=E\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}$$

$$\left(-\frac{\partial^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}}{\partial\xi^2}+\xi^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}\right)=\frac{2E}{\hbar\omega}\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}$$

Es obvio que $\frac{2E}{\hbar\omega}$ es constante. Llamémosla K:

$$\left(-\frac{\partial^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}}{\partial\xi^2}+\xi^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}\right)=K\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}$$

Y despejemos el diferencial de segundo orden (aprovechamos para cambiar el signo):

$$\left(-\frac{\partial^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}}{\partial\xi^2}\right)=K\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}-\xi^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}$$

$$\left(\frac{\partial^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}}{\partial\xi^2}\right)=\xi^2\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}-K\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}$$

$$\frac{\partial^2 \psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}}{\partial \xi^2} = (\xi^2 - K)\psi_{\left(\sqrt{\hbar/m\omega}\xi\right)}$$

Y, por economizar un poco, cambiemos, estéticamente, la función de ψ:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} = (\xi^2 - K)\psi$$

Y, para avanzar en nuestro modelo, suponemos que $\xi^2 \gg K$, podemos terminar expresando como[75]:

$$\frac{d^2 \psi}{d\xi^2} \approx \xi^2 \psi$$

Que es una ecuación diferencial notablemente más abordable que la primera expresión y cuya solución asintótica, pues nos basta con que sea aproximada, vamos a proceder a buscar mediante serie de potencias[76]. Estamos entonces ante el siguiente escenario:

---

[75] Aprovechamos para consignar ya que realmente se trata de una derivada total.

[76] Sabemos que el método de resolución de ecuaciones diferenciales por series de potencias nos recuerda, en cierta medida, a las series de Taylor y se basa en el siguiente patrón:

$$y' = y$$

$$y = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + c_4 x^4 + \cdots \infty = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$$

$$y' = c_1 + 2c_2 x + 3c_3 x^2 + 4c_4 x^3 + \cdots \infty = \sum_{n=1}^{\infty} n c_n x^{n-1}$$

Sustituyendo ahora en la ecuación diferencial tenemos que:

$$y' = y$$

$$c_1 + 2c_2 x + 3c_3 x^2 + 4c_4 x^3 + \cdots = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + c_4 x^4 + \cdots$$

De ello, por equivalencia obvia entre los coeficientes, podemos decir que:

$$c_1 = c_0$$
$$2c_2 = c_1 \rightarrow c_2 = \frac{c_1}{2} \rightarrow c_2 = \frac{c_0}{2}$$
$$3c_3 = c_2 \rightarrow c_3 = \frac{c_2}{3} \rightarrow c_3 = \frac{c_0}{6}$$

$$4c_4 = c_3 \rightarrow c_4 = \frac{c_3}{4} \rightarrow c_4 = \frac{c_0}{24}$$
$$c_n = \frac{c_0}{n!}$$

Es decir, que podemos afirmar que:

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_0}{n!} x^n$$

Como c_0 no está afectada en nada por n, podemos sacarla del sumatorio quedándonos:

$$y = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

Despleguemos esto:

$$y = c_0 \left(\frac{x^0}{0!} + \frac{x^1}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \cdots \infty \right)$$

$$y = c_0 \left(1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \cdots \infty \right)$$

Esto se parece mucho a… lo de siempre. ¿Un seno? No. ¿Un coseno? No. ¿El número e? Yeah. En este caso, desde luego pues si $y' = y$, ¿qué podíamos esperar? Siempre viene alguno de éstos al rescate. Recodemos que por Series de Taylor sabemos que:

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

Aplicando esto a nuestro problema inicial, nos queda que:

$$y = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

Donde c_0 es una constante, claro.
Antes de aplicar este método hay que tener en consideración varias cuestiones:

1. No es universalmente válida.
2. La convergencia de $\sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$. Veamos un ejemplo:

Supongamos:

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} x^n = 1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + \cdots$$

Si $x = 0$, ok, la expresión tiene sentido. $y = 1$.
Pero si $x = 1$, ok, la serie no converge sino que crece hasta el ∞. Es decir, diverge.

Esto quiere decir que nuestra expresión sólo nos sirve para casos de series convergentes como, por ejemplo, $x = 1/2$:

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} x^n = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \frac{1}{16} + \cdots$$

Es decir que nuestra serie converge para valores de x:

$$-1 < x < +1$$

Esta serie converge en $\frac{1}{1-x} = 2$.

3. Si podemos expresar una función y mediante nuestra serie de potencias, entonces podemos estar seguros de que existe derivada de esa función y se puede calcular como:

$$y' = \sum_{n=1}^{\infty} nc_n x^{n-1}$$

Veamos un ejemplo parecido al de nuestro texto. Supongamos que tenemos la siguiente ecuación diferencial ordinaria:

$$y'' = 4y$$

Recordemos que tenemos que:

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$$

$$y' = \sum_{n=1}^{\infty} nc_n x^{n-1}$$

Entonces podemos deducir que:

$$y'' = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)c_n x^{n-2}$$

Siendo esto así, reescribamos:

$$y'' = 4y$$

$$y'' - 4y = 0$$

$$\left(\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)c_n x^{n-2}\right) - 4\left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n\right) = 0$$

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)c_n x^{n-2} - \sum_{n=0}^{\infty} 4c_n x^n = 0$$

Ahora, para unir los dos sumatorios, hemos de homogeneizar rangos y exponentes. Para ello apliquemos esta propiedad Deus Ex Machina que es bastante obvia (la naturaleza se expresa por medios complejos pero inteligibles):

$$\sum_{n=k}^{\infty} f_{(n)} = \sum_{n=0}^{\infty} f_{(n+k)}$$

De manera que:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n + 2(n + 2 - 1)c_{n+2} x^{n+2-2} - \sum_{n=0}^{\infty} 4c_n x^n = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} n + 2(n + 1)c_{n+2} x^n - \sum_{n=0}^{\infty} 4c_n x^n = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n^2 + 3n + 2)c_{n+2} x^n - \sum_{n=0}^{\infty} 4c_n x^n = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n^2 + 3n + 2)c_{n+2} x^n - 4c_n x^n = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} [(n^2 + 3n + 2)c_{n+2} - 4c_n] x^n = 0$$

Sigamos operando, ahora, sólo con la parte entre corchetes:

$$(n^2+3n+2)c_{n+2}-4c_n=0$$

$$c_{n+2}=\frac{4c_n}{(n^2+3n+2)}$$

Empecemos a hacer sustituciones en ese fragmento de recurrencia:

$$n=0, c_2=\frac{4c_0}{(0^2+3\cdot 0+2)}=\frac{4}{2}c_0$$
$$n=1, c_3=\frac{4c_1}{(1^2+3\cdot 1+2)}=\frac{4}{6}c_1\rightarrow\frac{4}{3\cdot 2}c_1$$
$$n=2, c_4=\frac{4c_2}{(2^2+3\cdot 2+2)}=\frac{4}{12}c_2\rightarrow\frac{4}{4\cdot 3}c_2\rightarrow\frac{4}{4\cdot 3}\cdot\frac{4}{2}c_0\rightarrow\frac{4^2}{4\cdot 3\cdot 2}c_0$$
$$n=3, c_5=\frac{4c_3}{(3^2+3\cdot 3+2)}=\frac{4}{5\cdot 4}c_3\rightarrow\frac{4}{5\cdot 4}\cdot\frac{4}{3\cdot 2}c_1\rightarrow\frac{4^2}{5\cdot 4\cdot 3\cdot 2}c_1$$

Vemos este patrón:

$$c_2=\frac{4}{2}c_0\quad c_3=\frac{4}{3!}c_1\quad c_4=\frac{4^2}{4!}c_0\quad c_5=\frac{4^2}{5!}c_1\quad c_6=\frac{4^3}{6!}c_0\quad c_7=\frac{4^3}{7!}c_1\quad c_8=\frac{4^4}{8!}c_0\quad c_9=\frac{4^4}{9!}c_1$$

Si sustituimos ahora en nuestra expresión general:

$$y=\sum_{n=0}^{\infty}c_nx^n$$

$$y=c_0+c_1x+c_2x^2+c_3x^3+c_4x^4+c_5x^5+c_6x^6+c_7x^7+c_8x^8+c_9x^9+\cdots$$

$$y=c_0+c_1x+\frac{4}{2}c_0x^2+\frac{4}{3!}c_1x^3+\frac{4^2}{4!}c_0x^4+\frac{4^2}{5!}c_1x^5+\frac{4^3}{6!}c_0x^6+\frac{4^3}{7!}c_1x^7+\frac{4^4}{8!}c_0x^8+\frac{4^4}{9!}c_1x^9$$

Agrupemos y saquemos factor común:

$$y=c_0\left(\frac{4}{2}x^2+\frac{4^2}{4!}x^4+\frac{4^3}{6!}x^6+\frac{4^4}{8!}x^8+\cdots\right)+c_1\left(x+\frac{4}{3!}x^3+\frac{4^2}{5!}x^5+\frac{4^3}{7!}x^7+\frac{4^4}{9!}x^9+\cdots\right)$$

$$y=c_0\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{4^nx^{2n}}{(2n)!}\right)+c_1\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{4^nx^{2n+1}}{(2n+1)!}\right)\rightarrow y=c_0\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2^2)^nx^{2n}}{(2n)!}\right)+c_1\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2^2)^nx^{2n+1}}{(2n+1)!}\right)$$
$$y=c_0\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^{2n}x^{2n}}{(2n)!}\right)+c_1\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^{2n}x^{2n+1}}{(2n+1)!}\right)$$
$$y=c_0\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2x)^{2n}}{(2n)!}\right)+c_1\left(\frac{1}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2\cdot 2^{2n}x^{2n+1}}{(2n+1)!}\right)$$
$$y=c_0\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2x)^{2n}}{(2n)!}\right)+\frac{c_1}{2}\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^{2n+1}x^{2n+1}}{(2n+1)!}\right)$$
$$y=c_0\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2x)^{2n}}{(2n)!}\right)+\frac{c_1}{2}\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2x)^{2n+1}}{(2n+1)!}\right)$$

Esto resulta que son las expresiones, en series, de coseno y el seno hiperbólico (esto nos debe sonar de nuestros estudios de Relatividad General conmigo mismo: Iohannes Svlis):

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2\psi$$

Y sabemos que las soluciones por serie de potencias a ecuaciones diferenciales de este tipo tienen solución según la siguiente estructura[77]:

$$\psi \approx Ae^{\left(-\xi^2/2\right)} + Be^{\left(\xi^2/2\right)}$$

$$\cosh(x) = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x)^{2n}}{(2n)!}\right) \qquad \sinh(x) = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x)^{2n+1}}{(2n+1)!}\right)$$

Es decir que podemos expresar nuestra función solución como:

$$y = c_0 \cosh(2x) + \frac{c_1}{2}\sinh(2x)$$

Es decir:

$$y = K_1 \cosh(2x) + K_2 \sinh(2x)$$

Pero resulta que podemos traer también aquí que (y eso lo vimos en nuestro texto sobre Relatividad General):

$$\cosh(x) = \left(\frac{e^x + e^{-x}}{2}\right) \qquad \sinh(x) = \left(\frac{e^x - e^{-x}}{2}\right)$$

Es decir, que nuestra función se puede expresar como:

$$y = K_1\left(\frac{e^{2x} + e^{-2x}}{2}\right) + K_2\left(\frac{e^{2x} - e^{-2x}}{2}\right)$$

$$y = \frac{K_1 e^{2x}}{2} + \frac{K_1 e^{-2x}}{2} + \frac{K_2 e^{2x}}{2} - \frac{K_2 e^{-2x}}{2}$$

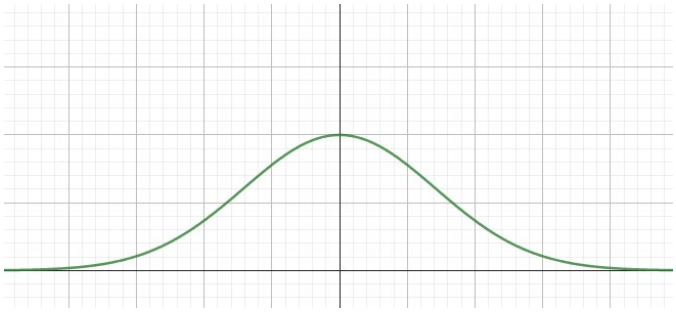
$$y = \frac{K_1 e^{2x}}{2} + \frac{K_2 e^{2x}}{2} + \frac{K_1 e^{-2x}}{2} - \frac{K_2 e^{-2x}}{2}$$

$$y = \left(\frac{K_1}{2} + \frac{K_2}{2}\right)e^{2x} + \left(\frac{K_1}{2} - \frac{K_2}{2}\right)e^{-2x}$$

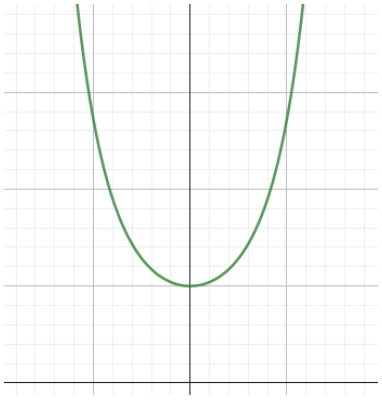
$$y = Ae^{2x} + Ae^{-2x}$$

[77] Véase nota anterior.

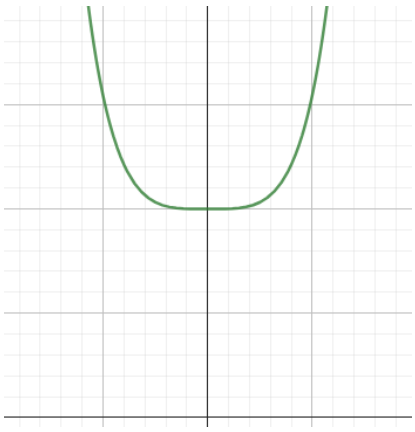
El primer término de la ecuación, $Ae^{\left(-\xi^2/2\right)}$, tiene un aspecto gráfico similar a éste:



El según término, $Be^{\left(\xi^2/2\right)}$, en cambio, es de este tipo:



Y la suma de ambos:



Obviamente, de los dos términos, el derecho, el del exponente positivo, provoca que se obtenga una gráfica no normalizable pues genera una función que crece hasta el infinito. Sólo el término izquierdo, con exponente negativo, es compatible con los resultados experimentales expresando una función normalizable que se *posa* asintóticamente sobre un eje. Esto quiere decir que en nuestra expresión, necesariamente, B debe ser igual a cero y nuestra función debe ser (para valores grandes de ξ) asintóticamente igual a:

$$\psi \approx Ae^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

Y ahora podemos definir nuestra expresión de manera que nuestra Función de onda en función de ξ sea igual (no asintóticamente aproximada, sino igual en este caso) a una determinada función de ξ multiplicada por una función exponencial[78]:

$$\psi_{(\xi)} = h_{(\xi)}e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

Vamos a acercar esta expresión a nuestra ecuación diferencial:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2\psi$$

Para ello derivemos una primera vez:

[78] Además, veremos, que en este nuevo escenario, y para valores grandes de ξ, la expresión original deja de tener comportamiento asintótico ya que el área que subsume la función es finita.

$$\frac{d\psi_{(\xi)}}{d\xi} = \frac{d}{d\xi} h_{(\xi)} e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

Esto es la derivada de un producto:

$$\frac{d\psi_{(\xi)}}{d\xi} = \frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} e^{\left(-\xi^2/2\right)} + h_{(\xi)} \frac{de^{\left(-\xi^2/2\right)}}{d\xi}$$

$$\frac{d\psi_{(\xi)}}{d\xi} = \frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} e^{\left(-\xi^2/2\right)} - h_{(\xi)} \xi e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

Y ahora hacemos la segunda derivada[79]:

$$\frac{d^2\psi_{(\xi)}}{d\xi^2} = \frac{d^2h_{(\xi)}}{d\xi^2} e^{\left(-\xi^2/2\right)} + \frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} \frac{de^{\left(-\xi^2/2\right)}}{d\xi} - \left(\frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} \xi e^{\left(-\xi^2/2\right)} + h_{(\xi)} \frac{d\xi}{d\xi} e^{\left(-\xi^2/2\right)} + h_{(\xi)} \xi e^{\left(-\xi^2/2\right)} \right)$$

$$\frac{d^2\psi_{(\xi)}}{d\xi^2} = \frac{d^2h_{(\xi)}}{d\xi^2} e^{\left(-\xi^2/2\right)} - \frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} \xi e^{\left(-\xi^2/2\right)} - \left(\frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} \xi e^{\left(-\xi^2/2\right)} + h_{(\xi)} e^{\left(-\xi^2/2\right)} - h_{(\xi)} \xi^2 e^{\left(-\xi^2/2\right)} \right)$$

$$\frac{d^2\psi_{(\xi)}}{d\xi^2} = \frac{d^2h_{(\xi)}}{d\xi^2} e^{\left(-\xi^2/2\right)} - 2\frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} \xi e^{\left(-\xi^2/2\right)} - h_{(\xi)} e^{\left(-\xi^2/2\right)} + h_{(\xi)} \xi^2 e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

$$\frac{d^2\psi_{(\xi)}}{d\xi^2} = \left(\frac{d^2h_{(\xi)}}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} - h_{(\xi)} + h_{(\xi)} \xi^2 \right) e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

[79] Atención que en el segundo término hay tres productos afectados.

$$\frac{d^2\psi_{(\xi)}}{d\xi^2} = \left(\frac{d^2h_{(\xi)}}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} + (\xi^2 - 1)h_{(\xi)}\right)e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

Es decir, que desde nuestras expresiones de base:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2} = (\xi^2 - K)\psi \qquad \psi_{(\xi)} = h_{(\xi)}e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

Podemos reescribir como:

$$\left(\frac{d^2h_{(\xi)}}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} + (\xi^2 - 1)h_{(\xi)}\right)e^{\left(-\xi^2/2\right)} = (\xi^2 - K)h_{(\xi)}e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

Y seguir transformando nuestra ecuación diferencial hasta esta nueva que podemos resolver por series de potencias:

$$\frac{d^2h_{(\xi)}}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} + (\xi^2 - 1)h_{(\xi)} = (\xi^2 - K)h_{(\xi)}$$

$$\frac{d^2h_{(\xi)}}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} + \xi^2h_{(\xi)} - h_{(\xi)} = \xi^2h_{(\xi)} - Kh_{(\xi)}$$

$$\frac{d^2h_{(\xi)}}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} + (K - 1)h_{(\xi)} = 0$$

Procedamos a resolverla, es decir, a encontrar la función $h_{(\xi)}$ [80]que satisface esta ecuación diferencial mediante la serie de potencias[81]:

$$h_{(\xi)} = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + a_3\xi^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\xi^n$$

$$\frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} = a_1 + 2a_2\xi + 3a_3\xi^2 + 4a_4\xi^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} na_n\xi^{n-1}$$

$$\frac{d^2h_{(\xi)}}{d\xi^2} = 2a_2 + 6a_3\xi + 12a_4\xi^2 + 20a_5\xi^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} n(n-1)a_n\xi^{n-2}$$

Sustituyamos en nuestra ecuación diferencial:

$$\frac{d^2h_{(\xi)}}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh_{(\xi)}}{d\xi} + (K-1)h_{(\xi)} = 0$$

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} n(n-1)a_n\xi^{n-2}\right) - \left(2\xi\sum_{n=0}^{\infty} na_n\xi^{n-1}\right) + (K-1)\left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n\xi^n\right) = 0$$

Para poder igualarlo todo necesitamos que las potencias a n sean todas iguales. Para el término del centro es fácil:

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} n(n-1)a_n\xi^{n-2}\right) - \left(2\sum_{n=0}^{\infty} na_n\xi\xi^{n-1}\right) + (K-1)\left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n\xi^n\right) = 0$$

[80] Al conocer $h_{(\xi)}$, conoceremos $\psi_{(\xi)}$ ya que, recordemos que anteriormente hemos concluido que:

$$\psi_{(\xi)} = h_{(\xi)}e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

[81] Véase nota 76.

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} n(n-1)a_n\xi^{n-2}\right)-\left(2\sum_{n=0}^{\infty} na_n\xi^{n}\right)+(K-1)\left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n\xi^{n}\right)=0$$

Para el primer término hace falta algo más. Para que $\xi^{n-2}=\xi^{n}$, cada vez que vea una n voy a sumarle 2, así:

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} n+2(n+2-1)a_{n+2}\xi^{n-2+2}\right)=\left(\sum_{n=¿?}^{\infty}(n+2)(n+1)a_{n+2}\xi^{n}\right)$$

En el límite inferior del sumatorio, que está fuera de la suma, pues es el que establece el rango, deberíamos poner que se empieza a contar dos puestos antes, es decir $n=-2$ pero, si nos fijamos, esta expresión para los valores $n=[-2,-1]$ anula totalmente la expresión haciéndola cero por lo que empezamos a contar, también, desde $n=0$. Tenemos entonces:

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty}(n+2)(n+1)a_{n+2}\xi^{n}\right)-\left(2\sum_{n=0}^{\infty} na_n\xi^{n}\right)+(K-1)\left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n\xi^{n}\right)=0$$

Que podemos reescribir como:

$$\sum_{n=0}^{\infty}(n+2)(n+1)a_{n+2}\xi^{n}-2na_n\xi^{n}+(K-1)a_n\xi^{n}=0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}[(n+2)(n+1)a_{n+2}-2na_n+(K-1)a_n]\xi^{n}=0$$

Para que esta igualdad se cumpla, y puesto que ξ^n debe ser diferente de cero ya que, si no, sería una solución trivial para nuestra función de onda, es necesario que:

$$(n+2)(n+1)a_{n+2} - 2na_n + (K-1)a_n = 0$$

Que es lo mismo que:

$$a_{n+2} = \frac{2n - K + 1}{(n+2)(n+1)} a_n$$

Esto en nuestra expresión:

$$h_{(\xi)} = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + a_3\xi^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\xi^n$$

Hace que los coeficientes a_n se desplacen hacia la derecha dos posiciones, claro, hasta el infinito. Por un lado los pares, dependiendo de a_0 y, por otro, los impares, partiendo de a_1. Necesitamos conocer esos dos coeficientes generadores que no son sino las condiciones iniciales que condicionarán la solución a nuestro problema.

Para poder resolver esto hemos de preguntarnos primero: ¿converge esta serie en algún sitio antes del infinito o se dirige directamente hacia el infinito? Observemos que nuestra expresión para la serie es autorreferente… Ciertamente esto nos suena a e.

Si la serie no cesa y llega al infinito resulta que obtendríamos un resultado para $h_{(\xi)}$ muy cercano una exponencial[82]:

$$h_{(\xi)} \approx e^{\xi^2}$$

Y esto es un problema ya que, sabiendo que hemos encontrado que:

$$\psi_{(\xi)} = h_{(\xi)} e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

Tendríamos que:

$$\psi_{(\xi)} = e^{\xi^2} e^{\left(-\xi^2/2\right)} = e^{\left(\xi^2/2\right)}$$

Que ya hemos visto que no es normalizable y, por lo tanto, no es compatible con la realidad física y, por ello, no válida.

Para que nuestra función sea compatible con la realidad física es necesario que la serie que la resuelva termine antes de llegar al infinito y por lo tanto tenemos que evitar términos como $e^{\left(\xi^2/2\right)}$.

[82] Fijémonos en el paralelismo entre la definición por series de la exponencial de una función, por ejemplo, x:

$$e^x = 1 + \frac{x^1}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

Y nuestra expresión conjugada:

$$a_{n+2} = \frac{2n - K + 1}{(n+2)(n+1)} a_n$$

Sustituida en:

$$h_{(\xi)} = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + a_3\xi^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$$

¿Cómo conseguimos una altura de 'potencia máxima' que haga *colapsar* la serie de potencias?

Supongamos que tenemos una máxima potencia n. Ya sabemos que:

$$a_{n+2} = \frac{2n - K + 1}{(n+2)(n+1)} a_n$$

Si imponemos que n es la máxima potencia, entonces:

$$a_{n+2} = \frac{2n - K + 1}{(n+2)(n+1)} a_n = 0$$

Y puesto que a_n no es cero, es necesario que:

$$\frac{2n - K + 1}{(n+2)(n+1)} = 0$$

Y para ello, obligadamente[83]:

$$K = 2n + 1$$

[83] Recordemos que K estaba relacionado con la energía:

$$K = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

Es fácilmente observable cómo esta expresión manifiesta el carácter cuantizado de la energía posible.

Ahora, antes de seguir hagamos un pequeño inciso analizando la estructura recurrente de nuestra serie de potencias[84].

$$y = a_0 + a_1\xi + a_0\xi^2 + a_1\xi^3 + a_0\xi^4 + a_1\xi^5 + a_0\xi^6 + a_1\xi^7 + \cdots$$

Si quisiéramos que, por ejemplo, la máxima potencia fuera ξ^4 sería necesario que se cumplieran dos condiciones:

$$a_0 \neq 0 \quad y \quad a_1 = 0$$

Es decir, la obligación de normalización de la mecánica cuántica nos obliga a aceptar dos tipos de soluciones: a) si la máxima potencia es par ($a_0 \neq 0 \mid a_1 = 0$) o b) impar ($a_0 = 0 \mid a_1 \neq 0$), nunca ambas a la vez.

Teniendo esto en cuenta, desarrollemos antes nuestra conclusión previa:

$$K = 2n + 1$$

$$\frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1$$

$$E = \frac{\hbar\omega(2n+1)}{2}$$

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Apliquemos ahora las condiciones que hemos establecido. Veamos los primeros casos.

[84] Véase nota 76.

Estamos ante una serie de potencias que nos describe la función $h_{(\xi)}$ que satisface la ecuación diferencial de Schrödinger bajo la forma reducida para el oscilador armónico. Recordemos que:

$$\psi_{(\xi)} = h_{(\xi)} e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

Así, siendo que:

$$h_{(\xi)} = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + a_3\xi^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$$

Entonces, si quisiéramos que la serie $h_{(\xi)}$ *colapsara* en $h_{(0)} = a_0$, necesitaríamos

$$h_{(0)}: \begin{cases} a_0 \neq 0 \\ n = 0 \\ a_1 = 0 \end{cases} \rightarrow h_{(0)} = a_0 \rightarrow \psi_{0(\xi)} = a_0 e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

Y para los demás casos:

$$h_{(1)}: \begin{cases} a_0 = 0 \\ n = 1 \\ a_1 \neq 0 \end{cases} \rightarrow h_{(1)} = a_1\xi \rightarrow \psi_{1(\xi)} = a_1\xi e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

$$h_{(2)}: \begin{cases} a_0 \neq 0 \\ n = 2 \\ a_1 = 0 \end{cases} \rightarrow h_{(2)} = a_2\xi^2 \rightarrow \psi_{2(\xi)} = a_2\xi^2 e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

Pero recordemos nuestra relación recurrente para una energía conocida (la asociada a la máxima potencia n):

$$a_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+2)(j+1)} a_j$$

Realmente $h_{(2)}$ sería:

$$h_{(2)}: \begin{cases} a_0 \neq 0 \\ n = 2 \\ a_1 = 0 \end{cases} \rightarrow h_{(2)} = a_0 + a_2 \xi^2$$

$$h_{(2)} = a_0 + a_0 \left(-\frac{2(2-0)}{2 \cdot 1} \right) \xi^2$$

$$h_{(2)} = a_0 + a_0(-2)\xi^2$$

$$h_{(2)} = a_0(1 - 2\xi^2)$$

Y, por lo tanto $\psi_{2(\xi)}$:

$$\psi_{2(\xi)} = a_0(1 - 2\xi^2) e^{\left(-\xi^2/2\right)}$$

Si seguimos avanzando en los cálculos de $h_{(\xi)}$ obtendríamos una secuencia de Polinomios Hermíticos: polinomios ortogonales que satisfacen, como hemos visto, relaciones de recurrencia.

Vale.